

Universität
Rostock



Traditio et Innovatio

Mathematische Modelle zur Rekonstruktion von Zellnetzwerken auf Multielektrodenarrays

Der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Universität Rostock
zur Erlangung des akademischen Grades eines
Dr. rer. nat.

eingereichte Dissertation

vorgelegt von
Sebastian Hanisch aus Rostock,

Rostock, 26. August 2016

Gutachter:

1. Gutachter:

Prof. Dr. Konrad Engel,
Institut für Mathematik, Universität Rostock

2. Gutachter:

Prof. Dr. Sergei Bezrukov,
Department of Math and Computer Science,
University of Wisconsin - Superior

Datum der Einreichung: 26. August 2016

Datum der Verteidigung: 13. Januar 2017

Danksagungen

Zunächst möchte ich mich bei meinem Betreuer Prof. Dr. Konrad Engel bedanken, der mich über den gesamten Zeitraum der Arbeit sehr gut betreut hat und viele hilfreiche Hinweise gegeben hat. Weiterhin möchte ich meiner Familie und insbesondere meinen Eltern Astrid Hanisch und Jörg Nitschke danken, die mich während meines Studiums immer unterstützt haben. Zudem möchte ich mich bei den Mitarbeitern Matthias Nissen, Dr. Werner Baumann und Dr. Tom Reimer aus der Biophysik bedanken, dass sie mir bei Fragen bezüglich des Anwendungsteils meiner Arbeit hilfreich zur Seite standen und auch reale Daten zur Verfügung gestellt haben. Ich möchte außerdem noch meinen Freunden Ingo Warnke, Jochen Merker, Thomas Elsen und Tanja Auge sehr danken, die sich die Zeit genommen haben, die komplette Arbeit oder zumindest Teile davon kurz vor der Fertigstellung durchzulesen und mich auf Fehler und mögliche Verbesserungen hinzuweisen. Zu guter Letzt möchte ich mich noch für die finanzielle Unterstützung meiner Arbeit durch das DFG-Graduiertenkolleg 1505 Welisa bedanken.

Eigene Veröffentlichungen von Teilen der Dissertation

Ergebnisse der Abschnitte 2.1 und 2.2 sind auch im folgenden Artikel veröffentlicht:

- Konrad Engel, Sebastian Hanisch. Reconstruction of cell-electrode-adjacencies on multielectrode arrays. *Journal of Computational Neuroscience*, 37(3), 583–591, 2014.

Resultate der Abschnitte 3.1 – 3.4 sind auch in folgendem Artikel im Arxiv enthalten:

- Konrad Engel, Sebastian Hanisch. Bandwidth of graphs resulting from the edge clique covering problem. *arXiv:1605.00450*, 2016.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Mathematische Modellierung von Zellsignalen auf Multielektrodenarrays	9
2.1	Modellierung des Multielektrodenarrays und Simulation von Spikes . . .	9
2.2	Rekonstruktion der Nachbarschaftsmenge	15
2.2.1	Definition des Verzögerungsgraphen	15
2.2.2	Schätzung der Spitzen	18
2.2.3	Schätzung der Nachbarschaftenmenge	19
2.3	Spike-Sorting unter idealen Bedingungen	24
2.4	Heuristische Verbesserungsmöglichkeiten	34
2.5	Schätzung des Verbindungsgraphen mittels Cliquesüberdeckungen . .	43
3	Bandbreitenbestimmung des Graphen $G_{n,k,b}$	51
3.1	Elementare Eigenschaften von $G_{n,k,b}$	53
3.2	Asymptotik der Bandbreite von $G_{n,k,b}$ im Fall $b = o(n)$	55
3.3	Bandbreite von $G_{n,k,b}$ im Fall $b \geq \frac{n+k-1}{2}$	58
3.4	Asymptotik der Bandbreite von $G_{n,k,b}$ im Fall $b \sim \beta n$ mit $\beta \in (0, 0.5]$. .	63
3.4.1	Approximation durch ein Problem auf dem Einheitsquadrat . .	63
3.4.2	Obere Schranken für die Bandbreite	71
3.4.3	Untere Schranken für die Bandbreite	85
3.5	Verallgemeinerung von $k \in [2, b + 1]$ auf $K \subseteq [2, b + 1]$	89
4	Zusammenfassung und Ausblick	95
	Literaturverzeichnis	97
A	Anhang	101
A.1	Ergebnisse der Nachbarschaftsschätzung bei realen Daten	101

Abbildungsverzeichnis

1.0.1	Neurochip	2
1.0.2	Neuronen auf Neurochip	3
1.0.3	Reale Wellenformen	4
2.1.1	Wellenform-Fitting	12
2.1.2	Überlappende Templates	15
2.2.1	Verzögerungsgraph	16
2.2.2	Simulierte Aufzeichnungen	23
2.3.1	Charakteristische Nachbarschaft und partielle Abbildung	31
2.4.1	Redundante Instanz	37
2.5.1	Verzögerungsgraph bei fehlenden Spikeaufzeichnungen	45
3.2.1	Beispiel zur lexikographischen Ordnung	57
3.3.1	Beispiel zur einfachen Palindromordnung	60
3.4.1	Einfache Palindromordnung im Einheitsquadrat für $\beta = \frac{2}{3}$	66
3.4.2	Einfache Palindromordnung im Einheitsquadrat für $\beta = \frac{9}{20}$	67
3.4.3	Polygone und wichtige Punkte im Einheitsquadrat für Fall a)	67
3.4.4	Polygone und wichtige Punkte im Einheitsquadrat für Fall b)	69
3.4.5	Beispiel-Integrationsgebiet	70
3.4.6	Ordnung im Fall a)	73
3.4.7	Wichtige Punkte für die obere Schranke für Fall a).	75
3.4.8	Wichtige Polygone für die obere Schranke von Fall a)	76
3.4.9	Weitere wichtige Polygone für die obere Schranke von Fall a)	76
3.4.10	Vergleich der einfachen Palindromordnung mit der Ordnung aus Fall a)	77
3.4.11	Ordnung für Fall b)	79
3.4.12	Wichtige Punkte für die obere Schranke für Fall b).	81
3.4.13	Wichtige Polygone für die obere Schranke von Fall b)	82
3.4.14	Weitere wichtige Polygone für die obere Schranke von Fall b)	83

Tabellenverzeichnis

2.2.1	Ergebnisse der Nachbarschaftsschätzung auf simulierten Daten . . .	24
2.4.1	Testserienparameter für Spike-Sorting auf simulierten Daten ohne Messfehler	42
2.4.2	Ergebnisse für Spike-Sorting auf simulierten Daten ohne Messfehler	43
A.1.1	Nachbarschaftsschätzungen zu Netzwerk 1: Zeitintervall 1	105
A.1.2	Nachbarschaftsschätzungen zu Netzwerk 1: Zeitintervall 2	105
A.1.3	Nachbarschaftsschätzungen zu Netzwerk 2: Zeitintervall 1	107
A.1.4	Nachbarschaftsschätzungen zu Netzwerk 2: Zeitintervall 2	107
A.1.5	Nachbarschaftsschätzungen zu Netzwerk 3: Zeitintervall 1	108
A.1.6	Nachbarschaftsschätzungen zu Netzwerk 3: Zeitintervall 2	109
A.1.7	Netzwerkvergleichsergebnisse: Netzwerk 1	110
A.1.8	Netzwerkvergleichsergebnisse: Netzwerk 2	111
A.1.9	Netzwerkvergleichsergebnisse: Netzwerk 3	111

Kapitel 1

Einleitung

Das Gehirn ist eine sehr komplexe organische Struktur, welche von Neurowissenschaftlern untersucht wird. Diese versuchen herauszufinden, wie die Kommunikation zwischen den mehr als 100 Milliarden Nervenzellen funktioniert. Dabei verfolgen sie unterschiedliche Ziele und benutzen verschiedene Techniken, um neue Einblicke und Erkenntnisse zu gewinnen.

Neurologen wollen den Einfluss von Krankheiten wie Alzheimer, Epilepsie oder Parkinson auf das Gehirn verstehen und Behandlungsmöglichkeiten entwickeln. Neuroinformatiker versuchen unter anderem den Zusammenhang und die Bedeutung der Signale der einzelnen Neuronen zu verstehen. Damit können beispielsweise Gehirn-Computer-Schnittstellen entworfen werden, sodass der Computer die Signale der einzelnen Neuronen interpretieren kann. So können Prothesen angesteuert werden, die nicht mehr funktionsfähige oder nicht mehr vorhandene Körperteile ersetzen. Außerdem geht es um die Fragen, wie Informationen im Gehirn weitergeleitet werden, wie Lernprozesse ablaufen und welche Rolle die Netzwerkstruktur des Gehirns dabei spielt. Natürlich wird das Gehirn ebenfalls von Neurobiologen und Elektroingenieuren untersucht, die auf der biochemischen und bioelektrischen Ebene die Prozesse in den Nervenzellen verstehen wollen.

Unabhängig von der konkreten Fragestellung ist es bei den meisten Untersuchungen notwendig, die Signale der Neuronen aufzuzeichnen, die der Kommunikation dieser untereinander dienen. Dazu gibt es mehrere Techniken, wie zum Beispiel die Elektroenzephalografie (EEG), welche die Hirnströme direkt am Lebewesen misst. Allerdings werden dort sehr viele Neuronen gleichzeitig aufgezeichnet, deren Signale nicht auseinanderzuhalten sind. Wenn also ein detaillierteres Bild der einzelnen Neuronen benötigt wird, muss auf andere Hilfsmittel zurückgegriffen werden. Dabei ist insbesondere das Feuerverhalten von einzelnen Neuronen von Interesse, also die zeitliche Abfolge der Signale des Neurons, die sogenannte *Pulsfolge*. Solche Pulsfolgen lassen sich nur lokal in einer kleinen Umgebung messen. Das kann sowohl *in-vivo*, also durch implantierte Elektroden im Lebewesen, als auch *in-vitro* gesche-

hen. Bei solchen In-vitro-Experimenten werden dem Lebewesen Nervenzellen entnommen, die in einer Nährlösung kultiviert werden und so außerhalb des Körpers am Leben erhalten werden. Diese Neuronen bilden Netzwerke und feuern spontan oder durch externe Einflüsse, wie zum Beispiel elektrische Stimulation.

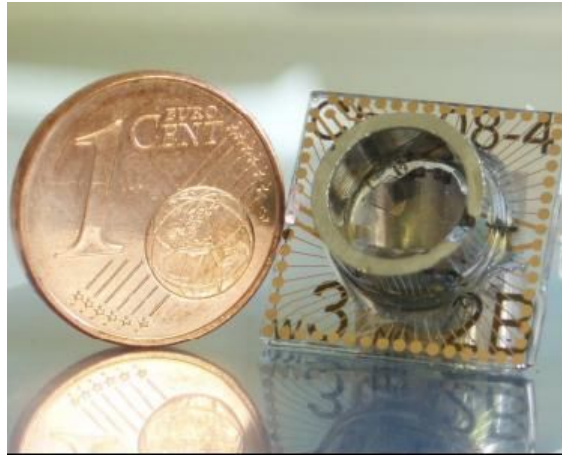


Abb. 1.0.1: Neurochip mit integriertem Multielektrodenarray zur extrazellulären Aufzeichnung von Aktionspotentialen der auf dem Chip in einer Nährlösung kultivierten Neuronen. (Quelle: [45])

In dieser Arbeit soll es hauptsächlich um Daten gehen, die aus In-vitro-Experimenten gewonnen werden. Für solche Experimente wurden zunächst nur einzelne Mikroelektroden verwendet, die Potentialänderungen in ihrer Umgebung aufzeichnen und so die Signale der Zellen – sogenannte Aktionspotentiale, die wegen ihrer spitzen Form auch Spikes genannt werden – nachweisen. Dies wird als *extrazelluläre Aufzeichnung* bezeichnet. Bei der *intrazellulären Aufzeichnung* hingegen werden die Aktionspotentiale direkt an der Zelle gemessen, zum Beispiel mit der sogenannten Patch-Clamp-Technik. In diesem Fall ist natürlich bekannt, von welcher Zelle die aufgezeichneten Signale stammen. Bei der extrazellulären Aufzeichnung ist das nicht so ohne Weiteres der Fall. Dort können die aufgezeichneten Signale sogar von mehreren Zellen (Neuronen) stammen, die sich in der Nähe der Elektrode befinden. Das Problem, die Signale den verschiedenen Zellen zuzuordnen, wird Spike-Sorting genannt. Dieses Problem tritt klarerweise immer noch auf, wenn statt nur einer Mikroelektrode viele davon verwendet werden. Mit diesen sogenannten Multielektrodenarrays – kurz MEAs – können die Signale mehrerer Zellen aufgezeichnet werden. Platziert sind sie, wie in Abbildung 1.0.1 zu sehen, beispielsweise als integrierte MEAs zur extrazellulären Aufzeichnung auf Neurochips. Auf diese Weise können die Signale einer Zelle von verschiedenen Elektroden erfasst werden, sofern die Elektroden dicht beieinander liegen. Dies legt zumindest die Detailansicht der Mikroskopieaufnahme aus Abbildung 1.0.2 nahe. Diese Ansicht zeigt Neuronen, die

über die Elektroden eines Neurochips wachsen und Zellnetzwerke bilden.

Dies lässt zusätzliche Möglichkeiten des Vergleichs zwischen Aufzeichnungen von verschiedenen Elektroden zu, die sich für das Spike-Sorting-Problem gewinnbringend nutzen lassen. Das Auffinden und Ausnutzen dieser Vergleichsmöglichkeiten, die bisher kaum beachtet wurden, ist Gegenstand dieser Arbeit. Deswegen konzentrieren wir uns auf MEAs mit einer hohen Elektrodendichte, also geringen Abständen zwischen den Elektroden, wie beispielsweise in [5, 16]. Die Artikel [46, 42, 36, 40] beschreiben den Einsatz von MEAs in-vivo, beispielsweise in der Retina des Auges. Insbesondere [42] nutzt dabei „geographische“ Informationen, um ihren Hauptalgorithmus zu unterstützen.

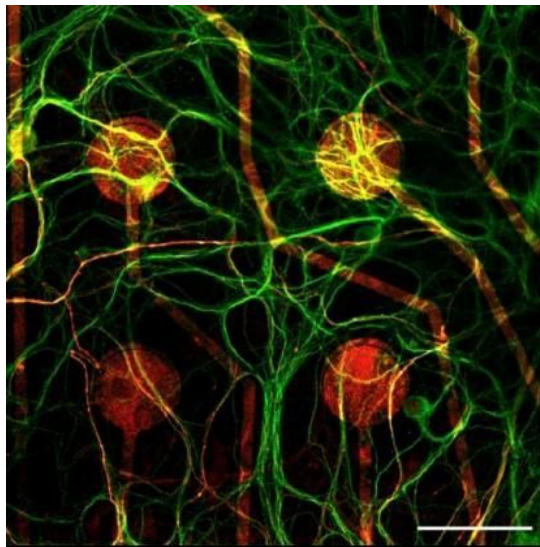


Abb. 1.0.2: Neuronen, die über den Elektroden auf dem Neurochip wachsen und Zellnetzwerke bilden. (Quelle: [45])

Das Ziel der vorliegenden Arbeit besteht darin, einen Beitrag zum Spike-Sorting-Problem zu liefern, der explizit die Vorteile eines Multielektrodenarrays ausnutzt, indem die zeitlichen Verzögerungen der aufgezeichneten Signale der Neuronen an mehreren Elektroden algorithmisch ausgewertet werden. Dieser Algorithmus soll den in [42] vorgestellten Ansatz weiterentwickeln. Als weitere Zielsetzung hat sich im Verlauf der Arbeit eine umfassende Untersuchung der Bandbreite einer speziellen Graphenklasse herauskristallisiert, die sich bei der Bearbeitung der ersten Zielstellung als relevant und interessant herausgestellt hat.

Populäre Ansätze für das Spike-Sorting-Problem nutzen die spezielle Signalform des Spikes eines Neurons dazu, um die Neuronen voneinander zu unterscheiden, denn diese sogenannten Wellenformen sind für unterschiedliche Zellen an derselben Elektrode verschieden. In Abbildung 1.0.3 sind rechts Ausschnitte aus den Aufzeichnungsdaten mehrerer Elektroden dargestellt. Auf der linken Seite sind mehrere

Wellenformen übereinandergelegt, die bereits farblich vom Programm aufgrund ihrer Form zwei Klassen zugeordnet wurden. Diese stammen dann wahrscheinlich von zwei verschiedenen Zellen.

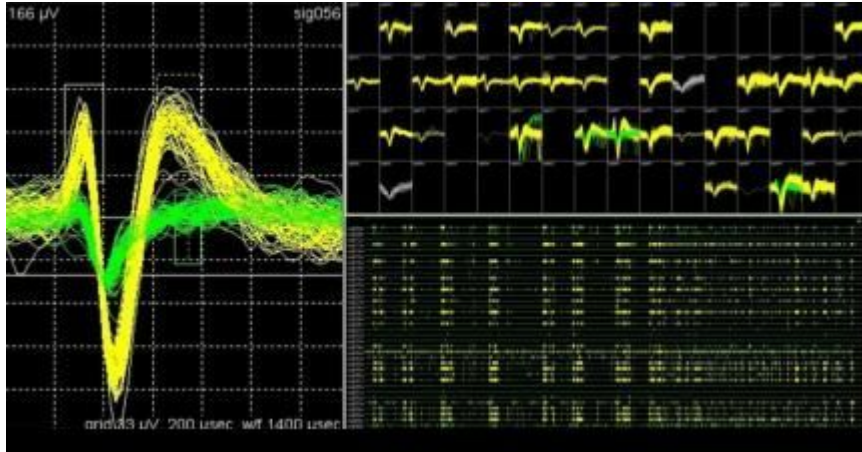


Abb. 1.0.3: Hier ist die Visualisierung von 39 erkannten extrazellulär aufgezeichneten Wellenformen einer Elektrode zu sehen. Links sind diese Wellenformen überlagert in einem Bild dargestellt und schon geclustert, das heißt den vermuteten Zellen zugeordnet und entsprechend farblich gekennzeichnet. Rechts oben finden sich die Ausschnitte aus der Aufzeichnung der Elektrode, die für das linke Bild überlagert wurden. Rechts unten sind die Zeitpunkte für mehrere Elektroden als Striche dargestellt, an denen Spikes erkannt und die zugehörigen Wellenformen gespeichert wurden. (Quelle: [45])

Ein Überblick über solche und andere vorgeschlagene Methoden für das Spike-Sorting-Problem findet sich zum Beispiel in [21] und [34]. Dass solche Ansätze überhaupt funktionieren, liegt daran, dass die Wellenformen über einen gewissen Zeitraum konstant sind, solange sich die relative Position der Zelle zur Elektrode nicht ändert. Diesen Fakt nutzen wir ebenfalls aus, um im zweiten Arbeitsschritt eine an die Realität angelehnte Testumgebung zu entwickeln, bei der extrazelluläre Aufzeichnungen mit solchen Wellenformen-Templates simuliert werden, die realen Aufzeichnungen nachempfunden sind. Durch das Hinzufügen von Hintergrundrauschen soll dies noch weiter verstärkt werden. Diese Konstruktion von künstlichen Daten ist ähnlich zu früheren Ansätzen in [33, 44, 19, 38]. Da wir allerdings eine große Anzahl von Zellen und viele Szenarien simulieren wollen, nutzen wir keine Wellenformen aus Datenbanken, sondern erzeugen die Wellenformen mittels einer Template-Funktion und zufällig gewählten Parametern. Die Parameter stammen dabei aus Intervallen, die durch die Anpassung der Funktion an reale Daten gewonnen wurden, sodass die entstehenden Templates Ähnlichkeit mit realen Wellenformen besitzen. Außerdem betrachten wir zeitliche Verzögerungen zwischen dem Entstehen der Spikes an der Zelle und der Aufzeichnung der Spikes an den Elektroden.

Damit ergibt sich ein weiteres Problem: Das Herausfiltern von Existenz und Zeitpunkt der Wellenformen aus den Aufzeichnungsdaten. Es muss also nach gewissen Kriterien entschieden werden, wann die gemessenen Potentialwerte als durch eine Zelle verursachte Wellenform erkannt werden und wann es sich um Rauschen handelt. Für dieses Spike-Detection-Problem existieren verschiedene Ansätze, die hier kurz vorgestellt werden sollen. Zum einen gibt es relativ einfache Ansätze, wie zum Beispiel die Identifizierung über einen festgelegten Schwellwert. Wenn das Potential diesen Schwellwert unterschreitet, so wird das als Spike interpretiert. Dem liegt zugrunde, dass sich das Potential an der Elektrode beim Auftreten eines Spikes kurzzeitig deutlich verringert. Siehe hierzu auch Abbildung 1.0.3, die Spitze des Spikes zeigt nach unten. Es gibt allerdings auch wesentlich kompliziertere Methoden, die beispielsweise in [2] miteinander verglichen werden. Hier in dieser Arbeit wird eine relativ einfache Spike-Detection-Methode entwickelt, die hauptsächlich auf der Erkennung von deutlichen lokalen Potentialminima beruht, also primär die Potentialunterschiede und nicht die absoluten Potentialwerte betrachtet. Bei der Spike-Erkennung werden die Zeitpunkte festgelegt, an denen die Wellenformen aufgezeichnet wurden. Dafür ist es wichtig, dass die Wellenformen einer Zelle relativ konstant bleiben und ein spezifischer Punkt auf der Wellenform genommen wird, der gegenüber Rauschen relativ unempfindlich ist. Über einen längeren Zeitraum kann es jedoch passieren, dass sich die Wellenformen [18, 43] und somit die zugewiesenen Zeitpunkte ändern. Das muss bei längeren Aufzeichnungen berücksichtigt werden; für Untersuchungen auf kurzen Zeiträumen ist dies aber nicht relevant. Ähnliche Probleme ergeben sich ebenfalls, wenn zwei Spikes von verschiedenen Zellen zu fast derselben Zeit aufgezeichnet werden und sich die Wellenformen überlappen [47]. Ein Ansatz, um diesem Problem zu begegnen, wird in [19] entwickelt. Einen anderen verfolgen wir mit unserer schon erwähnten Spike-Detection-Methode.

Nachdem nun die Zeitpunkte und Wellenformen der Spikes der Zellen möglichst gut erkannt wurden, beginnt der hauptsächlich algorithmische Auswertungsteil. Wie bereits angesprochen, ist es bei hoher Elektrodendichte der MEAs wahrscheinlich, dass die Signale einer Zelle von mehr als einer Elektrode aufgezeichnet werden. Wir nennen die Menge dieser Elektroden die *Nachbarschaft* der Zelle. Ohne das Wissen um die Nachbarschaft könnten Aufzeichnungen an verschiedenen Elektroden statt als einzelne Zelle als mehrere Zellen identifiziert werden. Das kann falsche Schlüsse nach sich ziehen, wie etwa eine vermutete Synchronizität von Zellen, die gar nicht existiert. Außerdem ergeben sich durch die Kenntnis der Nachbarschaften zusätzliche Informationen, die für das Spike-Sorting-Problem hilfreich sein können. Die Grundidee zur Bestimmung der Nachbarschaft ist, dass die Signale einer Zelle an den Elektroden ihrer Nachbarschaft mit von der Lage der Elektrode abhängigen konstanten zeitlichen Verzögerungen aufgezeichnet werden. Das bedeutet, dass, kurz

nachdem die Zelle feuert, das Signal von der ersten Elektrode aufgezeichnet wird, nach einer weiteren konstanten Zeitspanne dann von der zweiten Elektrode und so weiter, bis es schließlich an allen Elektroden in der Nachbarschaft registriert wurde. Dieses zeitliche Verzögerungsmuster in den Aufzeichnungsdaten der Elektroden ergibt sich bei jedem Feuern der Zelle. Wenn solch ein Verzögerungsmuster oft genug gefunden wird, so wird die Menge der Elektroden, an denen dies auftaucht, als eine Nachbarschaft einer Zelle betrachtet. Hierzu führen wir als Hilfsmittel den sogenannten *Verzögerungsgraphen* ein.

Eine Methode, die bereits explizit die Vorteile von Multielektrodenarrays ausnutzt, ist die Unabhängigkeitsanalyse [7], die schon an künstlichen Daten getestet wurde [35] und auch kürzlich bewertet wurde [27]. Sie versucht die Signale von verschiedenen Quellen, die an mehreren Empfängern aufgezeichnet werden und sich dort überlagern, wieder in die einzelnen voneinander unabhängigen Signale aufzuspalten. Diese Methode könnte ebenso von der Kenntnis der Nachbarschaften profitieren, wenn sie zum Spike-Sorting eingesetzt wird, da die zu betrachtenden Elektroden gezielter ausgewählt werden können und eine auf weniger Elektroden beschränkte Anwendung eventuell bessere Ergebnisse erzielen könnte. Allerdings hat die Unabhängigkeitsanalyse ebenso Nachteile, wie zum Beispiel, dass vorausgesetzt werden muss, dass die Anzahl der Quellen höchstens so groß wie die Anzahl der Empfänger ist, was aber bei dichten Netzwerken mit vielen Zellen nicht der Fall sein muss. In diesem Fall würden nicht alle Zellen erkannt werden. Ein weiteres allgemeines Problem bei der Bestimmung der Nachbarschaften und damit der Zellerkennung sind Fehler bei der Spike-Erkennung. Insbesondere das Problem partiell nicht aufgezeichneter Spikes, also solche, die nicht von allen Elektroden in der Nachbarschaft der Zelle aufgezeichnet wurden, wollen wir in dieser Arbeit noch etwas genauer untersuchen.

Nun wollen wir den Inhalt der einzelnen Abschnitte kurz anreißen. Zunächst benötigen wir ein mathematisches Modell eines MEAs, um darauf aufbauend Algorithmen zu entwickeln, die für das Spike-Sorting-Problem hilfreich sein können. Dieses Modell wird zusammen mit der Simulation der künstlichen Daten in Abschnitt 2.1 beschrieben. Abschnitt 2.2.1 führt den Verzögerungsgraphen ein, dessen Knotenmenge sich in der praktischen Anwendung aus der in Abschnitt 2.2.2 dargestellten Spike-Erkennungsmethode ergibt. Die algorithmische Bestimmung der Kantenmenge des Verzögerungsgraphen und die darauf aufbauende Bestimmung der Nachbarschaften wird in Abschnitt 2.2.3 beleuchtet. Eine statistische Auswertung des Algorithmus an einer ganzen Reihe der vorher simulierten Daten findet sich schließlich am Ende dieses Abschnitts. Weitere Ergebnisse dieser Methode bei Anwendung auf reale Daten der Mitarbeiter des Lehrstuhls für Biophysik der Universität Rostock finden sich im Anhang A.1. Ein theoretischer Ansatz einer Spike-Sorting-Methode

für ideale Daten, also solche ohne jegliche Messfehler, wird auf den Methoden der Nachbarschaftsbestimmung aufbauend in Abschnitt 2.3 entwickelt. Diese Ergebnisse könnten gleichermaßen auf andere mathematisch modellierte Probleme angewendet werden, bei denen aus einer gegebenen Menge von Zeitreihen eine unbekannte Menge von Zeitreihen rekonstruiert werden soll, aus denen sich die gegebenen Zeitreihen zusammensetzen. Das Grundgerüst, das auf dem Verzögerungsgraphen beruht, wird durch Heuristiken in Abschnitt 2.4 erweitert, um bessere Ergebnisse zu erzielen, da selbst bei fehlerfreien Daten Schwierigkeiten auftreten können, die eine eindeutige Zuordnung der Signale zu den Zellen verhindern. Abschnitt 2.5 beschäftigt sich schließlich mit dem Fall, dass ein Spike einer Zelle nicht von allen in ihrer Nachbarschaft befindlichen Elektroden aufgezeichnet wird. Wenn das oft genug passiert, so kann es vorkommen, dass nur Teilnachbarschaften der eigentlichen Nachbarschaften geschätzt werden.

Die Komplexitätsbetrachtungen der algorithmischen Lösung führen schließlich auf ein Bandbreitenproblem für eine spezielle Klasse von Graphen, das wir in Kapitel 3 ausführlich untersuchen. Die Bandbreite eines Graphen $G = (V, E)$ ist dabei der kleinste Wert $B(G)$, sodass eine injektive Nummerierung $f : V \rightarrow \mathbb{N}$ der Knoten von G existiert, sodass der Absolutbetrag der Differenz der Nummern zweier benachbarter Knoten in G höchstens $B(G)$ beträgt. Zunächst betrachten wir in Abschnitt 3.1 einige grundlegende Eigenschaften dieser Graphenklasse, die wir mit $G_{n,k,b}$ bezeichnen. Dabei sind die Knoten Teilmengen von $\{0, 1, \dots, n\}$, $n \in \mathbb{N}$, der fest gewählten Mächtigkeit $k \in \mathbb{N} \setminus \{0, 1\}$, deren maximales und minimales Element sich um höchstens $b \in \mathbb{N}$ unterscheiden. Wir untersuchen in den folgenden Abschnitten, wie sich die Bandbreite von $G_{n,k,b}$ in Abhängigkeit der Parameter n und b verhält. In Abschnitt 3.2 betrachten wir im Vergleich zu n kleine b und analysieren mit elementaren Methoden, wie sich die Bandbreite von $G_{n,k,b}$ für große n näherungsweise (asymptotisch) entwickelt, wenn b wesentlich langsamer wächst als n ($b = o(n)$). Im darauffolgenden Abschnitt 3.3 entwickeln wir die Ideen aus Abschnitt 3.2 weiter und ermitteln so die exakte Bandbreite von $G_{n,k,b}$ für den Fall, dass $b \geq \frac{n+k-1}{2}$ ist, also für im Vergleich zu n große b . Mithilfe von Methoden aus der Analysis untersuchen wir in Abschnitt 3.4 die asymptotische Bandbreite von $G_{n,k,b}$, falls b näherungsweise in demselben Verhältnis wächst wie n (genauer: $b \sim \beta n$ mit $\beta \in (0, 0.5]$). Dazu projizieren wir den Graphen in das Einheitsquadrat und definieren dort ein Maß für verschiedene Polygone. Mittels dieser Polygone bestimmen wir verschiedene obere und untere Schranken für die asymptotische Bandbreite von $G_{n,k,b}$. Schließlich verallgemeinern wir die Ergebnisse der Abschnitte 3.1 – 3.4 in Abschnitt 3.5, indem wir statt eines festen k eine Menge K von unterschiedlichen Mächtigkeiten zulassen. Die Ergebnisse für diese Verallgemeinerung sind schließlich für das Problem in Abschnitt 2.5 relevant. Die Dissertation entstand in Zusammenarbeit mit meinem

Betreuer Prof. Dr. Konrad Engel, der insbesondere in Abschnitt 3.4 seine Kenntnisse einbrachte.

Kapitel 2

Mathematische Modellierung von Zellsignalen auf Multielektrodenarrays

2.1 Modellierung des Multielektrodenarrays und Simulation von Spikes

Das Ziel dieses Abschnitts ist, ein relativ realistisches Modell eines Multielektrodenarrays (MEA) mitsamt einer Kultur von Neuronen zu entwerfen. Das beinhaltet zunächst die geometrische Modellierung des Multielektrodenarrays. Darauf aufbauend wird dann die Neuronenkultur über die Lage der künstlichen Zellkerne und die abstrakte elektrische Verbindung zu den Elektroden zufällig erzeugt. Schließlich werden noch die Signale (Spikes) der Neuronen und deren Aufzeichnungen an den Elektroden über einen bestimmten Zeitraum simuliert. Zunächst legen wir die geometrische Form des MEAs fest. Wir betrachten eine relativ einfache Gitterstruktur, allerdings können andere Formen analog betrachtet werden. Das MEA wird als Rechteck mit den Seitenlängen $n_x, n_y \in \mathbb{N}$ betrachtet, zum Beispiel $n_x = n_y = 10$, bei dem die Zentren der Elektroden die Koordinaten $(0.5 + j_x, 0.5 + j_y)$ besitzen, wobei $j_x \in \{0, 1, \dots, n_x - 1\}$, $j_y \in \{0, 1, \dots, n_y - 1\}$. Dann ist $n = n_x \cdot n_y$ die Anzahl der Elektroden. Die Elektroden sind Zeile für Zeile nummeriert, das heißt die Elektrode mit den Koordinaten $(0.5 + j_x, 0.5 + j_y)$ bekommt die Bezeichnung $j = n_x \cdot j_y + j_x$. Umgekehrt besitzt die Elektrode mit der Bezeichnung j die Koordinaten $(0.5 + j_x, 0.5 + j_y)$ mit

$$j_y = \lfloor j/n_x \rfloor \text{ und } j_x = j - n_x \cdot j_y. \quad (2.1)$$

Als nächstes positionieren wir die Zellen (Neuronen) auf dem MEA und danach legen wir die elektrischen Kontakte zwischen Zellen und Elektroden fest. Sei m die Anzahl der Zellen, zum Beispiel $m = 100$. Wir gehen davon aus, dass jede Zelle

elektrischen Kontakt zu den Elektroden haben kann, deren Zentren innerhalb eines Kreises mit Radius R um die Zelle liegen, mit beispielsweise $R = 2.0$. Allerdings besteht solch ein Kontakt nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit p , zum Beispiel $p = 0.2$. Präziser gesagt wählen wir für die Simulationen zufällig einen Punkt $(z_x, z_y) \in [0, n_x] \times [0, n_y]$, der als die Position des Zellkerns interpretiert werden kann. Sei nun $C = \{(j_x, j_y) : (0.5 + j_x - z_x)^2 + (0.5 + j_y - z_y)^2 \leq R^2\}$. Dann hat die Zelle keinerlei elektrischen Kontakt zur Elektrode $j = n_x \cdot j_y + j_x$ falls $(j_x, j_y) \notin C$, und falls $(j_x, j_y) \in C$, dann besteht ein elektrischer Kontakt mit Wahrscheinlichkeit p . So entstandene Zellen ohne jeglichen Kontakt zu Elektroden werden verworfen. Dafür wird dann eine neue, wieder zufällig positionierte Zelle erzeugt. Das geschieht so lange, bis die gewünschte Anzahl von Zellen, die jeweils mindestens zu einer Elektrode elektrischen Kontakt haben, erzeugt ist. Dadurch wird sichergestellt, dass die Signale von allen m Zellen auch aufgezeichnet werden. Wir definieren weiter den Abstand $\varrho(e_{j_1}, e_{j_2})$ von zwei Elektroden e_{j_1} und e_{j_2} als den euklidischen Abstand ihrer Zentren auf dem MEA, das heißt wir setzen

$$\varrho(e_{j_1}, e_{j_2}) := \sqrt{(j_{1,x} - j_{2,x})^2 + (j_{1,y} - j_{2,y})^2},$$

wobei die x - und y - Koordinaten wie in (2.1) gegeben sind. Aus der Konstruktion ergibt sich die folgende notwendige Bedingung für die Existenz eines elektrischen Kontaktes einer Zelle zu zwei beliebigen Elektroden des Gitters e_{j_1} und e_{j_2} :

$$\varrho(e_{j_1}, e_{j_2}) \leq 2R. \quad (2.2)$$

Unabhängig von der konkreten Geometrie haben wir eine Menge von Zellen $\mathcal{Z} = \{z_1, \dots, z_m\}$, die als **unbekannt** angesehen wird, und eine Menge von Elektroden $\mathcal{E} = \{e_1, \dots, e_n\}$, die klarerweise **bekannt** ist. Weiterhin haben wir entweder Kontakt oder keinen Kontakt zwischen der Zelle z_i und der Elektrode e_j , das heißt z_i und e_j sind entweder *adjacent* oder *nicht adjacent*. Diese Adjazenzen sind natürlich **unbekannt**, da schon die Menge der Zellen unbekannt ist. Das führt auf den ebenfalls unbekannten bipartiten *Verbindungsgraphen* $G_C = (V_C, E_C)$ mit $V_C = \mathcal{Z} \cup \mathcal{E}$ und $E_C = \{\{z_i, e_j\} : \text{Zelle } z_i \text{ hat elektrischen Kontakt zu Elektrode } e_j\}$. Im Folgenden benutzen wir die Kurznotation $[h] = \{1, \dots, h\}$. Die *Nachbarschaft* N_i der Zelle z_i ist die Menge der Indizes von Elektroden, die adjacent zu z_i sind, also

$$N_i = \{j \in [n] : z_i \text{ und } e_j \text{ sind adjacent}\}.$$

Die *Menge der Nachbarschaften* ist durch

$$\mathcal{N} = \{N_i : i \in [m]\}$$

definiert. Wir wollen hervorheben, dass ein primäres Ziel dieses Abschnitts der Arbeit die **Bestimmung von \mathcal{N}** ist. Die dazu gegebenen Daten sind die Menge der Elektroden und die Aufzeichnungen der elektrischen Signale an den Elektroden.

Den *Grad der Zelle* z_i definieren wir als die Mächtigkeit von N_i . Analog dazu definieren wir den *Grad der Elektrode* e_j als die Anzahl der Zellen, die zu e_j adjazent sind. Der durchschnittliche Grad einer Elektrode ist ungefähr $mp\pi R^2/n$, denn die Wahrscheinlichkeit, dass ein zufällig gewählter Punkt einen Abstand von höchstens R zu einem gegebenen Punkt eines Rechtecks mit der Fläche n hat, wobei der gegebene Punkt hinreichend weit vom Rand des Rechtecks entfernt ist, beträgt $\pi R^2/n$. Das multipliziert mit p ergibt die Wahrscheinlichkeit eines elektrischen Kontaktes zu der durch den Punkt gegebenen Elektrode. Das Ganze wird für jede einzelne der m Zellen betrachtet, wodurch der Faktor m im erwarteten Grad der Elektrode entsteht. Auf ähnliche Weise erhalten wir, dass der Durchschnittsgrad einer Zelle bei ungefähr $p\pi R^2$ liegt. Das sieht man so: Für jede einzelne Elektrode ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Zelle mit zufälligen Koordinaten einen Abstand von maximal R zur Elektrode hat, ungefähr $\pi R^2/n$. Die Wahrscheinlichkeit eines elektrischen Kontaktes mit dieser Zelle ist dann folglich $p\pi R^2/n$. Da es n Elektroden gibt und jede Elektrode diese Wahrscheinlichkeit aufweist und für den Durchschnittswert (Erwartungswert) der Zelladjazenzenanzahl die Wahrscheinlichkeit für alle Elektroden aufsummiert wird, kommt der Faktor n zustande, der sich dann herauskürzt. Zum Beispiel gilt, falls $R = 2, p = 0.2$ und $m = 2n$ sind, dass der Durchschnittsgrad einer Elektrode bei ungefähr 5 und der Durchschnittsgrad einer Zelle bei ungefähr 2.5 liegt. Dies sind nur Näherungen, da für Elektroden am Rand geringere Wahrscheinlichkeiten gelten und Zellen ohne Adjazenzen in dem Modell nicht betrachtet werden. Bei exakter Betrachtung sind die Durchschnittswerte also geringfügig anders. In welche Richtung sie sich unterscheiden, lässt sich nicht genau sagen, da die betrachteten Abweichungen gegenläufig sind, denn eine geringere Kontaktwahrscheinlichkeit verringert den Durchschnittsgrad, wohingegen das Weglassen von Zellen ohne elektrischen Kontakt den Durchschnittsgrad erhöht.

Wir setzen voraus, dass jede Elektrode die Potentialwerte mit einer *Aufzeichnungsfrequenz* f_r aufzeichnet, die zum Beispiel $f_r = 40$ kHz beträgt. Wir betrachten $1/f_r$ als *Zeiteinheit*. Bei $f_r = 40$ kHz entspricht einer Zeiteinheit eine Zeitspanne von 0,025 ms. Im Folgenden werden die Zeitmessungen in Zeiteinheiten angegeben. Sei T die Gesamtlänge einer Aufzeichnung in Zeiteinheiten. Somit haben wir für jede Elektrode e_j genau $T + 1$ Aufzeichnungspunkte, für die ein Potentialwert $r_{j,t}$, $t = 0, \dots, T$, gegeben ist. Falls in einer Zelle z_i ein Aktionspotential auftritt und z_i adjazent zu e_j ist, dann wird es von e_j mit einer gewissen *Verzögerung* $d_{i,j}$ aufgezeichnet, die von der Weglänge zwischen der Signalquelle am Anfang des Axons der Zelle und dem Teil des Axons, der der Elektrode am nächsten liegt, abhängt. Auch $d_{i,j}$ wird in Zeiteinheiten gemessen, sodass zum Beispiel für $f_r = 40$ kHz der Wert $d_{i,j} = 4$ einer Realzeitdauer von $4/40 = 0.1$ ms entspricht.

Nun erläutern wir, wie der Aufzeichnungsvektor $\mathbf{r}_j = (r_{j,k})$ der Elektrode e_j in

unserer Simulation erzeugt wird. Gewöhnlich hat die reine Anwesenheit einer Zelle keine Potentialänderung der Umgebung zur Folge, die von Elektroden aufgezeichnet werden könnte, aber im Falle des Auftretens eines Aktionspotentials (Spikes) lässt sich eine Potentialänderung beobachten. Für jedes adjazente Paar (z_i, e_j) führen wir ein *Template* $\tau = \tau_{i,j}$ der *Breite* w ein, mit beispielsweise $w = 80$, welche für eine Aufzeichnungsfrequenz von $f_r = 40$ kHz einer Realzeitdauer von 2 ms entspricht. Der Wert w ist eine obere Schanke für die Länge eines Zeitintervalls, in dem das von den Elektroden aufgezeichnete Potential auf Grund des Spikes einer einzelnen Zelle ungleich 0 sein kann. Jedes Template besitzt *Templatewerte* für die Zeitpunkte $0, 1, \dots, w$. Diese Templatewerte werden mittels einer *Templatefunktion* $\varphi_\tau : [0, w] \rightarrow \mathbb{R}$ erzeugt, das heißt, die Templatewerte sind gegeben durch $\varphi_\tau(0), \varphi_\tau(1), \dots, \varphi_\tau(w)$. Der Vergleich mit realen Daten legt nahe, die Templatefunktion als Superposition von zwei Gauß-Funktionen zu wählen, die jedoch verschiedene Vorzeichen und deutlich unterschiedliche Breiten aufweisen, das heißt

$$\varphi_\tau(t) = \alpha_1 e^{-\frac{(t-\beta_1)^2}{2\gamma_1^2}} + \alpha_2 e^{-\frac{(t-\beta_2)^2}{2\gamma_2^2}}, \quad \alpha_1 < 0, \alpha_2 > 0, \gamma_1 \ll \gamma_2, \beta_1 \approx \beta_2. \quad (2.3)$$

Der erste Term beschreibt die (abwärts gerichtete) Spitze des Templates und der zweite Term das Abflachen zu beiden Seiten.

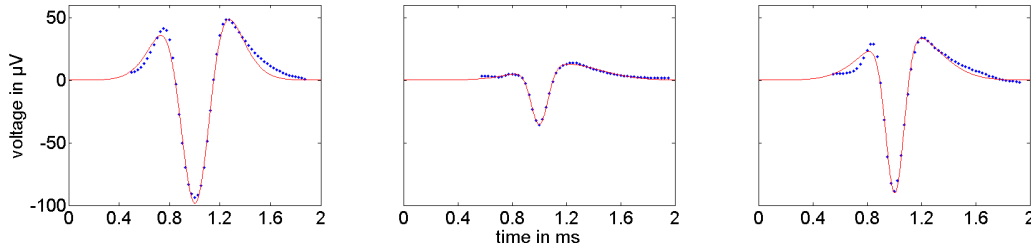


Abb. 2.1.1: Die Grafik zeigt drei Beispiele für die Fitting-Resultate. Die Durchschnittswellenformen von drei verschiedenen Zellen, die extrazellulär aufgezeichnet wurden, sind durch die Punkte dargestellt. Auf Grund von technischen Beschränkungen der Aufzeichnungen sind die Daten nur in einem kleineren Zeitintervall als 2 ms verfügbar. Die Kurven beschreiben die Approximation der Daten durch die Templatefunktion (2.3), deren Parameter durch eine Trust-Region-Methode für nichtlineare Regression in MATLAB® optimiert wurden.

Abbildung 2.1.1 zeigt 3 Beispiele der Approximation von realen Daten durch eine solche idealisierte Wellenform. Für die Erzeugung der aufgezeichneten Werte fixieren wir $\beta_2 = w/2$, da eine zeitliche Verschiebung der Templates sowieso nötig ist. Der Wert $\beta_2 = w/2$ stellt sicher, dass die Templatewerte wirklich sehr nahe bei 0 an den Intervallrändern liegen, zumindest wenn $\gamma_2 \leq w/5$ ist, da dann $e^{-25/8} < 0.05$ gilt. Für $\beta_1 = \beta_2$ erhalten wir $\min\{\varphi_\tau(t) : t \in [0, w]\} = \alpha_1 + \alpha_2$, sodass auch für $\beta_1 \approx \beta_2$ der Wert $\alpha_1 + \alpha_2$ ungefähr dem Minimum der Templatewerte entspricht. Die Koeffi-

zienten α_1 und α_2 haben physikalisch betrachtet die Einheit μV , also beispielsweise $\alpha_1 = -100 \mu\text{V}$ und $\alpha_2 = 30 \mu\text{V}$. Zu beachten ist, dass für $\beta_1 \neq \beta_2$ das Minimum nicht notwendigerweise exakt zum Zeitpunkt $t = w/2$ angenommen wird. Deswegen definieren wir die *Spitze* $\pi = \pi_\tau$ des *Templates* τ als den Zeitpunkt, an dem der minimale Templatewert angenommen wird, also

$$\pi_\tau := \arg \min \{ \varphi_\tau(t) : t \in \{0, 1, \dots, w\} \}.$$

Die Spitze kann als *Verankerungspunkt* des Templates interpretiert werden.

Das Feuerverhalten der Zellen modellieren wir als Erneuerungsprozess, bei dem eine Folge von Zeitpunkten erzeugt wird, die dann als Verankerungspunkte für das entsprechende Template angesehen werden. Die Intervalllänge zwischen zwei aufeinanderfolgenden Spikes ist dabei die Summe von einer Konstanten ρ , die die *Refraktärzeit* der Zelle modelliert, und der Realisierung einer exponentialverteilten Zufallsvariablen mit Parameter λ , wobei das Ganze wieder in Zeiteinheiten angegeben wird. Die Refraktärzeit beträgt ungefähr 1 ms, das heißt, wir setzen $\rho = f_r$ Zeiteinheiten. Der Parameter λ kann wie folgt bestimmt werden. Sei f_s die Feuerrate der Zelle, beispielsweise $f_s = 0.02 \text{ kHz}$ ($= 20 \text{ Hz}$). Dann ist die durchschnittliche Länge des Zeitintervalls zwischen zwei aufeinanderfolgenden Spikes einerseits $\rho + 1/\lambda$, da $1/\lambda$ der Erwartungswert der exponentialverteilten Zufallsvariablen ist, und andererseits f_r/f_s , wobei der Faktor f_r zur Umrechnung von ms in Zeiteinheiten dient. Somit ergibt sich

$$\lambda = \frac{f_s}{f_r - \rho f_s}.$$

Da f_s von Zelle zu Zelle variiert, gilt dies auch für den dieser Frequenz entsprechenden Parameter λ .

Auf diese Weise erhalten wir für jede Zelle z_i eine streng monoton wachsende Folge von p_i Zeitpunkten

$$s_{i,1} < s_{i,2} < \dots < s_{i,p_i},$$

die in Zeiteinheiten angegeben sind. Diese Folge ist die sogenannte *Pulsfolge* s_i der Zelle z_i .

Wenn die Zelle z_i zum Zeitpunkt s feuert, z_i adjazent zu e_j , $d = d_{i,j}$ die Verzögerung von z_i zu e_j und $\tau = \tau_{i,j}$ das Template für die Adjazenz (z_i, e_j) ist, dann ist der Beitrag dieser Zelle zum Aufzeichnungsvektor \mathbf{r}_j von e_j durch den Vektor $\mathbf{v} = \mathbf{v}_{i,j,s}$ gegeben, wobei

$$v_t = v_{i,j,s,t} = \begin{cases} \varphi_\tau(\pi_\tau + t - s - d) & , \text{ falls } s + d - \pi_\tau \leq t \leq w + s + d - \pi_\tau, \\ 0 & , \text{ sonst.} \end{cases}$$

Damit erhalten wir die (unter idealen Bedingungen) aufgezeichneten Werte an der Elektrode e_j durch

$$\mathbf{r}_j^{\text{ideal}} = \sum_{i:j \in N_i} \sum_{k=1}^{p_i} \mathbf{v}_{i,j,s_{i,k}}. \quad (2.4)$$

Aber in der Realität sind die Daten verrauscht. Deswegen ergänzen wir in der Simulation die rechte Seite von (2.4) durch zwei Arten von Rauschen. Die erste Art ist einfaches Weißes Rauschen, bei dem wir unabhängige Realisierungen ξ_t^g einer $N(0, \sigma^2)$ -verteilten Zufallsvariable für jedes $t \in \{0, 1, \dots, T\}$ erzeugen. Die zweite Art ist Hintergrundrauschen, das durch Zellen verursacht wird, die weiter entfernt von der Elektrode sind und somit nur mit kleinen Amplituden aufgezeichnet werden, also keinen richtigen elektrischen Kontakt zu dieser Elektrode besitzen. Wir nennen solche Paare von einer Zelle z_i und einer Elektrode e_j *pseudo-adjazent*, wenn sie nicht adjazent sind, aber einen euklidischen Abstand von höchstens $2R$ im geometrischen Aufbau vom Anfang dieses Abschnitts zueinander haben. Bezeichne N_i^p die Menge der pseudo-adjazenten Elektroden von z_i und sei

$$\xi^p = \kappa \sum_{i: j \in N_i^p} \sum_{k=1}^{p_i} v_{i,j,s_{i,k}},$$

wobei κ ein Dämpfungsfaktor ist, der durch den fehlenden direkten Kontakt erklärt wird, zum Beispiel $\kappa = 0.05$. Durch

$$r_j = r_j^{ideal} + \xi^g + \xi^p \quad (2.5)$$

haben wir nun die finalen simulierten aufgezeichneten Werte, also diejenigen, die wirklich **bekannt** sind.

Nun betrachten wir wieder die Situation, in der die Zelle z_i zum Zeitpunkt s feuert, z_i adjazent zu e_j ist und $d = d_{i,j}$ sowie $\tau = \tau_{i,j}$ die zugehörige Verzögerung und das Template sind. Der Spike von z_i zum Zeitpunkt s wird zum Zeitpunkt $s + d$ von e_j aufgezeichnet. Wir nennen alle solche Zeitpunkte $s + d$ *Spitzen von Elektrode e_j* . Auf diese Weise ist dann die Menge Π_j der Spitzen von e_j definiert durch

$$\Pi_j = \{s_{i,k} + d_{i,j} : j \in N_i, k \in [p_i]\}.$$

Wenn es keine Überlappung von Templates gibt, dann findet sich die ungefähre Form des Templates in einer Darstellung der aufgezeichneten Werte in der Umgebung des Zeitpunktes $s + d$ wieder, sodass es Ähnlichkeiten zwischen dem Wert an der Spitze π_τ von τ und dem an der Spitze $s + d$ von e_j gibt. Aber im Falle von Überlappungen ändert sich die Form. In einigen Fällen können die aufgezeichneten Wert deutlich von den Templatewerten abweichen, sie können sogar das Vorzeichen von negativ zu positiv ändern, siehe Abbildung 2.1.2.

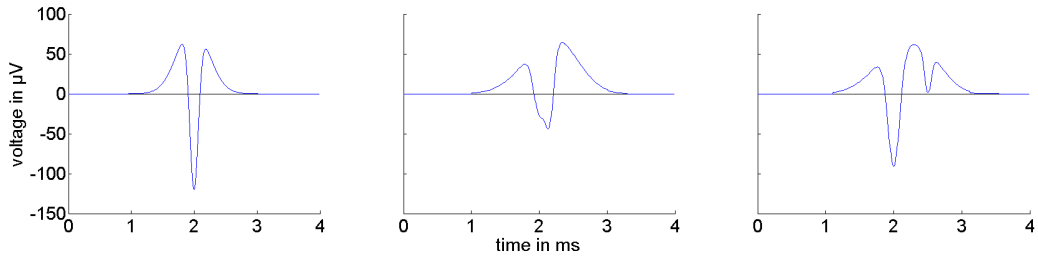


Abb. 2.1.2: Die Abbildung zeigt drei Beispiele von überlappenden Templates in Abwesenheit jeglichen Rauschens. Im ersten Beispiel liegen die beiden Spitzen exakt übereinander, sie treten also zu demselben Zeitpunkt auf, was zu einer Verstärkung der charakteristischen Merkmale der Templates führt. Das zweite Beispiel enthält zwei Templates, deren Spitzen 0.15 ms auseinanderliegen. Dort ist eine kleine Abweichung von der normalen Templateform sichtbar, ein kleiner Knick links von der Zentralspitze. Wenn allerdings noch Rauschen zu der Aufzeichnung hinzukommt, können beide Templates nicht mehr auseinandergehalten werden und das Ganze wird als eine Spitze erkannt. Im dritten Beispiel beträgt die Verzögerung der Spitzen der beiden Templates 0.5 ms. Bei einer Schwellwert-Spike-Erkennungsmethode würde die zweite Spitze nicht mehr erkannt werden. Allerdings stellt sie immer noch ein signifikantes lokales Minimum dar, sodass die Chance besteht, sie zu erkennen, solange das Rauschen nicht zu stark ist.

Falls die Spitzen von zwei Templates im Aufzeichnungsvektor sehr nahe beieinander liegen, das heißt, die Spitzen nicht weiter als 0.15 ms auseinanderliegen, reicht ein Zeitpunkt, um beide Spitzen zu repräsentieren. Falls sie weiter voneinander entfernt sind, bleibt die charakteristische Form beider Spitzen im Aufzeichnungsvektor halbwegs erhalten. Wir werden im nächsten Unterkapitel die charakteristische Form nutzen, um die Spitzen im Aufzeichnungsvektor zu erkennen und ihre unverfälschten Zeitpunkte zu schätzen.

2.2 Rekonstruktion der Nachbarschaftsmenge

2.2.1 Definition des Verzögerungsgraphen

Die Spitzen der Elektrode e_j seien der Größe nach geordnet, sodass die Elemente von Π_j gegeben sind durch

$$\pi_{j,1} < \pi_{j,2} < \dots < \pi_{j,q_j}, \quad j \in [n]. \quad (2.6)$$

Ausgehend von diesen Spitzen konstruieren wir einen **unbekannten** n -partiten Graph $G = (V, E)$, den wir *Verzögerungsgraph* nennen, wie folgt: Für $j \in [n]$, das heißt, für jede Elektrode e_j , identifizieren wir ihre Spitzen $\pi_{j,1}, \dots, \pi_{j,q_j}$ mit der Menge

$$V_j = \{(j, 1), \dots, (j, q_j)\}.$$

Die Vereinigung dieser Mengen sei die Knotenmenge des Verzögerungsgraphen:

$$V = \bigcup_{j=1}^n V_j.$$

Für $1 \leq j_1 < j_2 \leq n$, also für jedes geordnete Paar von Elektroden (e_{j_1}, e_{j_2}) , sei

$$E_{j_1, j_2} = \{ \{ (j_1, l_1), (j_2, l_2) \} : \exists i \in [m] : j_1, j_2 \in N_i \text{ und } \pi_{j_2, l_2} - \pi_{j_1, l_1} = d_{i, j_2} - d_{i, j_1} \},$$

das heißt zwei Knoten $(j_1, l_1), (j_2, l_2)$ sind durch eine Kante verbunden, wenn es eine Zelle z_i gibt, sodass e_{j_1} und e_{j_2} adjazent zu z_i sind und die Differenz zwischen den zugehörigen Spitzen gleich der Differenz der Verzögerungen von z_i zu e_{j_1} und zu e_{j_2} ist. Es ist zu beachten, dass wegen (2.2) $E_{j_1, j_2} = \emptyset$ gilt, falls $\varrho(e_{j_1}, e_{j_2}) > 2R$.

Die Vereinigung dieser Kantenmengen ergibt die Kantenmenge des Verzögerungsgraphen:

$$E = \bigcup_{1 \leq j_1 < j_2 \leq n} E_{j_1, j_2}.$$

Die Konzepte sind in Abbildung 2.2.1 dargestellt.

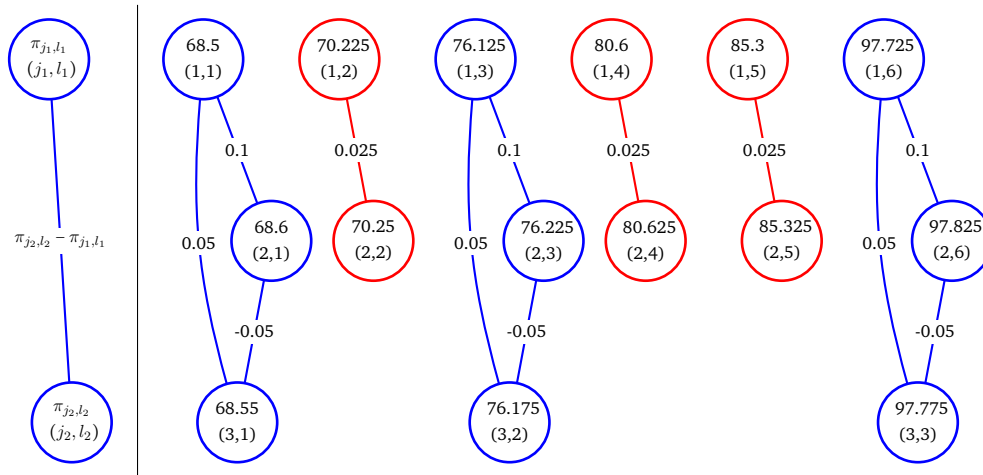


Abb. 2.2.1: Der rechte Teil der Abbildung zeigt einen kleinen Ausschnitt eines Verzögerungsgraphen. Jeder Kreis repräsentiert einen Knoten und enthält die folgenden Informationen: Die obere Zahl ist die Spitze in ms und das Paar darunter gibt den Namen des Knotens an. Das ist auch in der Legende auf der linken Seite des senkrechten Striches dargestellt. Insgesamt sind in der Abbildung drei Schichten von Knoten dargestellt. Alle Knoten in derselben Schicht gehören zu derselben Elektrode, was bedeutet, dass die erste Zahl des Paares, das den Knotennamen repräsentiert, identisch für alle diese Knoten ist. Es existiert eine Kante zwischen zwei Knoten, wenn die zugehörigen Spitzen durch dieselbe Zelle verursacht wurden. Die Zahl an der Kante ist die zugehörige Differenz der Spitzen und der Verzögerungen.

Sei d_{max} eine obere Schranke für die Verzögerung zwischen Zellen und Elektroden, zum Beispiel $d_{max} = w/10$.

Proposition 2.2.1. Falls $\{ (j_1, l_1), (j_2, l_2) \} \in E_{j_1, j_2}$ ist, dann gilt $|\pi_{j_2, l_2} - \pi_{j_1, l_1}| \leq d_{max}$.

Beweis. Nach Definition des Verzögerungsgraphen gibt es ein $i \in [m]$, sodass $|\pi_{j_2, l_2} - \pi_{j_1, l_1}| = |d_{i, j_2} - d_{i, j_1}| \leq d_{max}$. \square

Sei $s_{i, k}$ ein Zeitpunkt eines Aktionspotentials in der Pulsfolge von z_i . Für $j \in N_i$ ist der Zeitpunkt $s_{i, k} + d_{i, j}$ eine Spitze von e_j , sagen wir die l -te Spitze $\pi_{j, l}$. Die Indexmenge aller solcher Spitzen bildet die k -te Instanz $I_{i, k}$ der Zelle z_i , also

$$I_{i, k} = \{(j, l) : j \in N_i \text{ und } \pi_{j, l} = s_{i, k} + d_{i, j}\}.$$

Proposition 2.2.2. Die Instanz $I_{i, k}$ induziert einen vollständigen Teilgraphen von G .

Beweis. Wir müssen zeigen, dass zwei beliebige Knoten $(j_1, l_1), (j_2, l_2)$ der Instanz $I_{i, k}$ durch eine Kante verbunden sind. Nach Definition von $I_{i, k}$ gilt $j_1, j_2 \in N_i$ und $\pi_{j_1, l_1} = s_{i, k} + d_{i, j_1}$ sowie $\pi_{j_2, l_2} = s_{i, k} + d_{i, j_2}$. Daraus folgt $\pi_{j_2, l_2} - \pi_{j_1, l_1} = d_{i, j_2} - d_{i, j_1}$ und demzufolge sind die beiden Knoten durch eine Kante verbunden. \square

Es gibt p_i Instanzen der Zelle z_i im Verzögerungsgraphen, falls diese p_i -mal feuert. Außerdem ist, falls man weiß, dass die Menge $I_{i, k}$ eine Instanz von z_i ist, die Nachbarschaft von z_i durch

$$N_i = \{j \in [n] : \exists l \in [q_j] \text{ sodass } (j, l) \in I_{i, k}\}$$

gegeben. Demzufolge kann man die Nachbarschaften der Zellen erkennen, wenn man genug "ähnliche" vollständige Teilgraphen im Verzögerungsgraphen findet. Umgekehrt zur Definition der Instanz können wir die Ursachenmenge der Spitze $\pi_{j, l}$ wie folgt definieren:

$$R_{j, l} := \{\langle i, k \rangle : (j, l) \in I_{i, k}\}.$$

Sie enthält die Indexpaare der Spikes, die die erkannte Spitze erzeugt haben. Durch Überlappung der Wellenformen kann sie auch mehr als ein Element enthalten. Falls $\langle i, k \rangle \in R_{j, l}$ sagen wir, dass $\langle i, k \rangle$ eine Ursache von (j, l) ist (oder $\langle i, k \rangle$ erzeugt (j, l)). Im Folgenden nutzen wir Multimengen \mathcal{M} , das heißt Mengen deren Elemente a mit einer gewissen Vielfachheit $\mu(a)$ in ihr enthalten sind.

Sei ν eine untere Schranke für die Anzahl der Spikes einer einzelnen Zelle. Wenn \underline{f}_s eine untere Schranke für die Feuerrate der Zelle ist, können wir $\nu = T \underline{f}_s / f_r$ setzen. Sei

$$\mathcal{M}_{j_1, j_2}(\delta) = \{\pi_{j_2, l_2} - \pi_{j_1, l_1} : l_1 \in [q_{j_1}], l_2 \in [q_{j_2}], |\pi_{j_2, l_2} - \pi_{j_1, l_1}| \leq \delta\}.$$

Proposition 2.2.3. Sei $\delta = d_{max}$. Außerdem sei $(j_1, l_1) \in V_{j_1}$, $(j_2, l_2) \in V_{j_2}$ und $d = \pi_{j_2, l_2} - \pi_{j_1, l_1}$.

Falls $\{(j_1, l_1), (j_2, l_2)\} \in E_{j_1, j_2}$ ist, dann ist $d \in \mathcal{M}_{j_1, j_2}(\delta)$ und $\mu(d) \geq \nu$.

Beweis. Die Aussage gilt wegen Proposition 2.2.1 und der Voraussetzung, dass jede Zelle mindestens ν -mal feuert, da bei jedem Spike eine solche Kante im Verzögerungsgraphen entsteht. \square

2.2.2 Schätzung der Spitzen

Als Erstes müssen wir die Spitzen schätzen, also eine Folge

$$\tilde{\pi}_{j,1} < \tilde{\pi}_{j,2} < \dots < \tilde{\pi}_{j,\tilde{q}_j}, \quad j \in [n], \quad (2.7)$$

konstruieren, sodass für die meisten Folgenglieder von (2.6) ein zeitlich “nahes” Folgenglied von (2.7) existiert und umgekehrt. Wir nennen $\tilde{\Pi}_j = \{\tilde{\pi}_{j,1}, \tilde{\pi}_{j,2}, \dots, \tilde{\pi}_{j,\tilde{q}_j}\}$ die *geschätzte Spitzenmenge* von e_j . Wir konstruieren diese Menge wie folgt: Einer einfacheren Darstellung wegen, lassen wir den Index j weg und betrachten den Aufzeichnungsvektor $\mathbf{r} = (r_0, r_1, \dots, r_T)$. Zunächst glätten wir \mathbf{r} mit einem Binomialfilter, das heißt wir falten den Vektor \mathbf{r} mit dem Vektor $\frac{1}{2^{2b}} \left(\binom{2b}{0}, \binom{2b}{1}, \dots, \binom{2b}{2b} \right)$, wobei die Vektoreinträge als Funktionswerte des Komponentenindex aufzufassen sind. Für den Filter kann beispielsweise $b = \lfloor w/20 \rfloor$ verwendet werden. Das ändert nicht signifikant die graphische Darstellung der aufgezeichneten Werte, aber reduziert das Rauschen. Sei $\bar{\mathbf{r}} = (\bar{r}_0, \bar{r}_1, \dots, \bar{r}_T)$ das Ergebnis der Faltung. Dann suchen wir nach “signifikanten” lokalen Minima. Die Hauptidee ist nicht direkt aufeinanderfolgende geglättete Werte \bar{r}_{t-1} und \bar{r}_t zu vergleichen, sondern solche, die zeitlich etwas weiter auseinanderliegen. Präziser formuliert, legen wir einen Abstand d fest, beispielsweise $d = \lfloor w/16 \rfloor$, und berechnen die Werte

$$r'_t = \bar{r}_t - \bar{r}_{t-d}, \quad t \in \{0, 1, \dots, T\},$$

wobei $\bar{r}_t = 0$ falls $t \notin [0, T]$. Wir glätten diese Folge $\mathbf{r}' = (r'_0, r'_1, \dots, r'_T)$ von Differenzen nun noch einmal, aber dieses Mal mit einem Rechteckfilter, das heißt wir falten sie mit der $(2u+1)$ -elementigen Folge $\frac{1}{2u+1}(1, 1, \dots, 1)$, wobei zum Beispiel $u = \lfloor w/40 \rfloor$ gewählt wird. Dies ergibt die Folge $\bar{\mathbf{r}}' = (\bar{r}'_0, \bar{r}'_1, \dots, \bar{r}'_T)$. Dann legen wir die Schwellwerte η^- und η^+ fest, beispielsweise $\eta^- = -15 \mu V$ und $\eta^+ = 12 \mu V$. Um die Folge der geschätzten Spitzen zu konstruieren, gehen wir die Zeitpunkte $t = 0, 1, \dots, T$ nacheinander durch. Falls $\bar{r}'_t < \eta^-$ für ein t ist, kann man erwarten, dass es eine geschätzte Spitze in der Nähe von t gibt, da ein “steiler Abstieg” aufgetreten ist. Genauer gesagt, durchlaufen wir die Menge der Zeitpunkte $u = t + d/2, t + d/2 + 1, \dots, t + 2d$. Wenn wir einen ersten solchen Zeitpunkt u finden, für den $\bar{r}'_u > \eta^+$ gilt, dann haben wir wirklich eine geschätzte Spitze gefunden, da auch ein “steiler Anstieg” aufgetreten ist. Wir bestimmen nun die Spitze wie folgt: Sei $\tilde{\pi} = \arg \min\{\bar{r}'_v : v \in [t, u]\}$. Dann fügen wir $\tilde{\pi}$ zur Folge der geschätzten Spitzen hinzu und fahren mit $t = u + 1$ fort. Damit ist die Beschreibung der Menge der geschätzten Spitzen komplett.

Wenn die Aufzeichnungsfrequenz klein ist, also $f_r < 30$ kHz, dann können relevante Informationen verloren gehen. Insbesondere der minimale Wert an der Spitze könnte durch das grobe Aufzeichnungsraster gefallen sein. Dieser Nachteil kann

teilweise durch künstliches Verdoppeln der Aufzeichnungsfrequenz nach der eigentlichen Aufzeichnung kompensiert werden: Der gegebene Aufzeichnungsvektor $\mathbf{r} = (r_0, \dots, r_T)$ wird dann ersetzt durch den neuen Vektor $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{r}_0, \hat{r}_1, \dots, \hat{r}_{2T})$, wobei $\hat{r}_{2l} = r_l$ für $l \in \{0, \dots, T\}$ und $\hat{r}_{2l+1} = \frac{1}{16}(-r_{l-1} + 9r_l + 9r_{l+1} - r_{l+2})$ für $l \in \{1, \dots, T-2\}$ ist. Die Bestimmung von \hat{r}_{2l+1} ergibt sich aus einer Bestapproximation der vier Punkte $(i, r_i), i \in \{l-1, l, l+1, l+2\}$ durch eine allgemeine quadratische Funktion $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $h(x) = ax^2 + bx + c$. Das geschieht durch ein lineares Ausgleichsproblem mit der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & l-1 & (l-1)^2 \\ 1 & l & l^2 \\ 1 & l+1 & (l+1)^2 \\ 1 & l+2 & (l+2)^2 \end{pmatrix}$$

und dem Vektor $\mathbf{b} = (r_{l-1}, r_l, r_{l+1}, r_{l+2})^T$. Die Lösung des Normalgleichungssystems

$$A^T A \mathbf{p} = A^T \mathbf{b}$$

ergibt dann den optimalen Parametervektor $\mathbf{p}^* = (a^*, b^*, c^*)^T$ und damit eine bestapproximierende Funktion $h^*(x)$. Es gilt dann $h^*(l+0.5) = \frac{1}{16}(-r_{l-1} + 9r_l + 9r_{l+1} - r_{l+2})$ und somit wird dieser Wert \hat{r}_{2l+1} zugewiesen, der zwischen den originalen Werten r_l und r_{l+1} liegt.

Da wir den Verzögerungsgraphen nicht kennen, müssen wir mit einem *geschätzten Verzögerungsgraphen* $\tilde{G} = (\tilde{V}, \tilde{E})$ arbeiten. Die Knotenmenge V ist wie bei G definiert: Die Folgen der geschätzten Spitzen $\tilde{\pi}_{j,1}, \dots, \tilde{\pi}_{j,\tilde{q}_j}$ von e_j seien mit den Mengen

$$\tilde{V}_j = \{(j, 1), \dots, (j, \tilde{q}_j)\}$$

identifiziert und wiederum sei

$$\tilde{V} = \bigcup_{j=1}^n \tilde{V}_j.$$

2.2.3 Schätzung der Nachbarschaftenmenge

Für die Konstruktion der Kanten zwischen V_{j_1} und V_{j_2} müssen wir etwas mehr Aufwand betreiben, aber wenn wir diese Kantenmengen \tilde{E}_{j_1, j_2} erst einmal haben, dann setzen wir wie zuvor

$$\tilde{E} = \bigcup_{1 \leq j_1 < j_2 \leq n} \tilde{E}_{j_1, j_2}.$$

Zunächst setzen wir $\tilde{E}_{j_1, j_2} = \emptyset$ falls $\varrho(e_{j_1}, e_{j_2}) > 2R$ (wegen (2.2)). Im Folgenden sei $\varrho(e_{j_1}, e_{j_2}) \leq 2R$. Mit Proposition 2.2.3 im Hinterkopf definieren wir die *Multimenge der beschränkten Differenzen von geschätzten Spitzen* für die Konstruktion von \tilde{E}_{j_1, j_2} durch

$$\tilde{\mathcal{M}}_{j_1, j_2}(\delta) := \{\tilde{\pi}_{j_2, l_2} - \tilde{\pi}_{j_1, l_1} : l_1 \in [\tilde{q}_{j_1}], l_2 \in [\tilde{q}_{j_2}], |\tilde{\pi}_{j_2, l_2} - \tilde{\pi}_{j_1, l_1}| \leq \delta\}. \quad (2.8)$$

Allerdings können wir nicht einfach $\delta = d_{max}$ wie in Proposition 2.2.3 setzen, denn wir haben die Spitzen nicht exakt gegeben.

Wir nehmen an, dass die Schätzung der Spitzen mit einem Maximalfehler ε (gemessen in Zeiteinheiten), beispielsweise $\varepsilon = w/20$ durchgeführt werden kann. Sei wieder $s_{i,k}$ ein Puls der Pulsfolge von z_i und seien $j_1, j_2 \in N_i$. Wir nehmen an, dass die Schätzungen der Spitzen $s_{i,k} + d_{i,j_1}$ und $s_{i,k} + d_{i,j_2}$ durch $\tilde{\pi}_{j_1,l_1}$ und $\tilde{\pi}_{j_2,l_2}$ gegeben sind. Dann gilt

$$\begin{aligned} (s_{i,k} + d_{i,j_1} - \varepsilon) - (s_{i,k} + d_{i,j_2} + \varepsilon) &\leq \tilde{\pi}_{j_1,l_1} - \tilde{\pi}_{j_2,l_2} \\ &\leq (s_{i,k} + d_{i,j_1} + \varepsilon) - (s_{i,k} + d_{i,j_2} - \varepsilon), \end{aligned}$$

das heißt

$$d_{i,j_1} - d_{i,j_2} - 2\varepsilon \leq \tilde{\pi}_{j_1,l_1} - \tilde{\pi}_{j_2,l_2} \leq d_{i,j_1} - d_{i,j_2} + 2\varepsilon. \quad (2.9)$$

Daraus folgt $|\tilde{\pi}_{j_1,l_1} - \tilde{\pi}_{j_2,l_2}| \leq d_{max} + 2\varepsilon$ und deswegen setzen wir in (2.8)

$$\delta = d_{max} + 2\varepsilon. \quad (2.10)$$

Die Konstruktion von $\widetilde{\mathcal{M}}_{j_1,j_2}(\delta)$ kann einfach mit Algorithmus 1 durchgeführt werden.

In Anbetracht von (2.9) liegt die Differenz zweier geschätzter Spitzen, die von einer einzigen Zelle erzeugt wurden, mit Sicherheit in einem Intervall der Länge 4ε (dessen genaue Position unbekannt ist, denn die Differenz der Verzögerungen $d_{i,j_1} - d_{i,j_2}$ ist unbekannt). Das motiviert die folgende Definition: Ein Element d von $\widetilde{\mathcal{M}}_{j_1,j_2}$ wird *zulässig* genannt, falls es ein Intervall I der Länge 4ε gibt, sodass $d \in I$ und

$$\sum_{a \in I} \mu(a) \geq (1 - \theta_1)\nu,$$

wobei zum Beispiel $\theta_1 = 0.1$ ist. Wir erinnern daran, dass jede Zelle mindestens ν -mal feuert. Aber da einige Spitzen und somit auch Differenzen durch die Schätzung verloren gehen, fügen wir den Faktor $(1 - \theta_1)$ hinzu.

Nun können wir \widetilde{E}_{j_1,j_2} mittels

$$\widetilde{E}_{j_1,j_2} = \{ \{ (j_1, l_1), (j_2, l_2) \} : \tilde{\pi}_{j_2,l_2} - \tilde{\pi}_{j_1,l_1} \text{ ist ein zulässiges Element von } \widetilde{\mathcal{M}}_{j_1,j_2} \}$$

konstruieren. Algorithmisch kann das wie folgt durchgeführt werden: Als erstes berechnen wir die zulässigen Elemente von $\widetilde{\mathcal{M}}_{j_1,j_2}$. Dazu ordnen wir die Elemente von $\widetilde{\mathcal{M}}_{j_1,j_2}$ aufsteigend nach ihrer Größe, wobei jedes Element seiner Vielfachheit entsprechend oft in der Folge vertreten ist. Damit erhalten wir eine monoton wachsende endliche Folge $\mathbf{d} = (d_1, \dots, d_s)$. Für gegebenes $\zeta > 0$ nennen wir ein Intervall $[k, \ell]$ ein *für \mathbf{d} maximales ζ -Intervall*, falls $d_\ell - d_k \leq \zeta$ aber $d_{\ell+1} - d_k > \zeta$ und $d_\ell - d_{k-1} > \zeta$ gilt (mit der Definition $d_0 = -\infty, d_{s+1} = \infty$). Diese maximalen Intervalle können mit Algorithmus 2 ermittelt werden:

Algorithmus 1 Bestimmung der Multimenge der beschränkten Differenzen von geschätzten Spitzen

Input: Geschätzte Spitzen von den Elektroden e_{j_1} und e_{j_2} mit $\varrho(e_{j_1}, e_{j_2}) \leq 2R$ und

$$\delta := d_{max} + 2\varepsilon.$$

$$\mathcal{M}_{j_1, j_2} := \emptyset.$$

$$b := 1, l_2 := 1.$$

while $l_2 \leq \tilde{q}_{j_2}$ **do**

$$l_1 := b.$$

while $\tilde{\pi}_{j_1, l_1} < \tilde{\pi}_{j_2, l_2} - \delta$ **do**

$$l_1 := l_1 + 1.$$

if $l_1 = \tilde{q}_{j_1} + 1$ **then**

return

end if

end while

$$b := l_1.$$

while $\tilde{\pi}_{j_1, l_1} < \tilde{\pi}_{j_2, l_2} + \delta$ **und** $l_1 \leq \tilde{q}_{j_1}$ **do**

Füge $\tilde{\pi}_{j_1, l_1} - \tilde{\pi}_{j_2, l_2}$ zu \mathcal{M}_{j_1, j_2} hinzu.

$$l_1 := l_1 + 1.$$

end while

$$l_2 := l_2 + 1.$$

end while

Für die Folge $\mathbf{d} = (d_1, \dots, d_s)$ der Differenzen aus \mathcal{M}_{j_1, j_2} ermitteln wir nun alle maximalen 4ε -Intervalle. Zu beachten ist hierbei, dass die Intervallgrenzen ganze Zahlen sind, die sich auf die Indizes der Folgenglieder beziehen. Die Länge $\ell - k$ dieser Intervalle $[k, \ell]$ entspricht also der Anzahl der Differenzen minus 1, die im dazugehörigen Intervall $[d_k, d_\ell]$ der Länge $d_\ell - d_k \leq 4\varepsilon$ liegen. Wir betrachten nun also diejenigen dieser Intervalle $[k, \ell]$, die eine Länge von mindestens $(1 - \theta_1)\nu - 1$ besitzen. Alle d_i , deren Index i in einem dieser Intervalle liegt, sind zulässig. Nun wenden wir schließlich Algorithmus 1 in etwas modifizierter Art und Weise an. Anstatt $\tilde{\pi}_{j_1, l_1} - \tilde{\pi}_{j_2, l_2}$ zu \mathcal{M}_{j_1, j_2} hinzuzufügen, füge $\{(j_1, l_1), (j_2, l_2)\}$ zu \tilde{E}_{j_1, j_2} hinzu, falls $\tilde{\pi}_{j_1, l_1} - \tilde{\pi}_{j_2, l_2}$ zulässig ist. Damit ist die Konstruktion des geschätzten Verzögerungsgraphen komplett.

Nun bestimmen wir schließlich eine *geschätzte Nachbarschaftenmenge* \tilde{N} . Wir erinnern, dass die Instanz $I_{i, k}$ einer Zelle z_i einen vollständigen Teilgraphen im Verzögerungsgraphen induziert (Proposition 2.2.2). Deshalb kann man erwarten, dass für viele geschätzte Spitzen (j, l) die Menge

$$\tilde{N}(j, l) = \{j' \in [n] : \exists l' \in [\tilde{q}_j], \text{ sodass } \{(j, l), (j', l')\} \in \tilde{E}_{j, j'}\} \cup \{j\}$$

die Nachbarschaft N_i der Zelle z_i ergibt, die die geschätzte Spitze mit Index (j, l)

Algorithmus 2 Bestimmung maximaler ζ -Intervalle für monoton wachsende Folgen**Input:** Endliche monoton wachsende Folge $\mathbf{d} = (d_1, \dots, d_s)$ und $\zeta > 0$. $L = \emptyset$ (L ist die Menge der maximalen Intervalle.) $e = \max\{j : d_j - d_1 \leq \zeta\}$.Füge $[1, e]$ zu L hinzu.**for all** $i = 2, \dots, n$ **do** $e' = \max\{j : d_j - d_i \leq \zeta\}$.**if** $e' > e$ **then** $e = e'$.Füge $[i, e]$ zu L hinzu.**end if****end for****Output:** L .

erzeugt hat. Gewöhnlich kann diese Nachbarschaft von jedem Knoten (j, l) , der eine von z_i erzeugte geschätzte Spitze repräsentiert, gefunden werden, also $|N_i|$ -mal. Demzufolge können wir mit allen (mindestens ν) Spikes von z_i mindestens $\nu|N_i|$ -mal diese Nachbarschaft finden, falls es keine Fehler bei der Schätzung der Spitzen gibt. Aber es kann auftreten, dass manche Spitzen falsch geschätzt wurden und demzufolge manche Kanten im geschätzten Verzögerungsgraphen entweder falsch oder sogar gar nicht konstruiert wurden. Daher führen wir einen Fehlertoleranzterm θ_2 ein, beispielsweise $\theta_2 = 0.2$, und setzen voraus, dass solch eine Menge N mindestens $(1 - \theta_2)\nu|N|$ -mal gefunden wird. Genauer gesagt, arbeiten wir wieder mit einer Multimenge \mathcal{M} , wobei wir mit der leeren Menge starten und für alle $(j, l) \in \tilde{V}$ die Menge $\tilde{N}(j, l)$ zu \mathcal{M} hinzufügen. Dann ist die geschätzte Menge der Nachbarschaften gegeben durch

$$\tilde{\mathcal{N}} = \{N \in \mathcal{M} : \mu(N) \geq (1 - \theta_2)\nu|N|\}.$$

Seien

$$\eta_m := \frac{|\mathcal{N} \setminus \tilde{\mathcal{N}}|}{|\mathcal{N}|} \text{ und } \eta_f := \frac{|\tilde{\mathcal{N}} \setminus \mathcal{N}|}{|\mathcal{N}|}$$

die *relative Anzahl von fehlenden und falschen Nachbarschaften*. Berechnet wurden Durchschnittswerte $\bar{\eta}_m$ und $\bar{\eta}_f$ für 100 Durchläufe des Algorithmus mit simulierten Daten, die jeweils über einen Zeitraum von 10 s für jedes ausgewählte Tripel (n, m, f_r) erzeugt wurden. Als Anzahlen der Elektroden wurden $n = 8 \cdot 8 = 64$ und $n = 10 \cdot 10 = 100$ verwendet und die Anzahl der Zellen wurde auf $m = n$, $m = 2n$ und $m = 3n$ gesetzt. Die verwendeten Aufzeichnungsfrequenzen waren $f_r = 20$ kHz, $f_r = 25$ kHz, $f_r = 40$ kHz und $f_r = 100$ kHz. Weiterhin haben wir eine Templatebreite von $w = 2 \cdot \{f_r\}$ mit $[f_r]_{SI} = \text{kHz}$ gewählt, um jeweils einen Zeitraum von 2 ms abzudecken. Die anderen Templateparameter sind zufällig (gleichverteilt) für jede

Adjazenz aus den folgenden Intervallen bestimmt worden, die durch eine Anpassung der Templatefunktion an reale Daten gewonnen wurden:

$$\begin{aligned}\alpha_1 &\in [-200 \mu V, -50 \mu V], & \alpha_2 &\in [-0.3\alpha_1, -0.6\alpha_1], \\ \beta_1 &\in [0.4w, 0.525w], & \beta_2 &= 0.5w, \\ \gamma_1 &\in [0.025w, 0.05w], & \gamma_2 &\in [0.1w, 0.2w].\end{aligned}$$

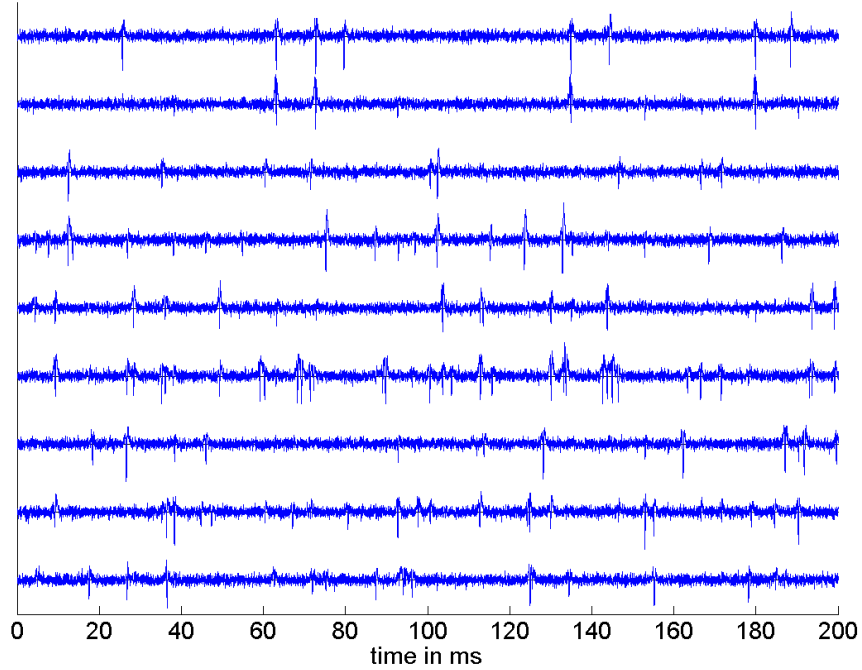


Abb. 2.2.2: Diese Abbildung zeigt 200 ms ungefilterte simulierte Aufzeichnungen von 9 Elektroden, die in einem Quadrat angeordnet sind. Die Simulation insgesamt wurde durchgeführt mit 100 Elektroden, 200 Zellen und einer Aufzeichnungsfrequenz von 40 kHz. Unter diesen Umständen können die meisten der durch Zellen erzeugten Spitzen erkannt werden und es gibt nur wenige Artefakte, die fälschlicherweise als Spitzen angesehen werden, so dass der Algorithmus gute Resultate liefert.

Die Verzögerungen und die Feuerrate der Zellen wurden auch zufällig (gleichverteilt) aus den Intervallen

$$d \in [0, w/20], \quad s_f \in [5 \text{ Hz}, 30 \text{ Hz}]$$

gewählt. Die anderen Parameter wurden wie folgt festgelegt: Radius $R = 2$, Kontaktwahrscheinlichkeit $p = 0.2$, Refraktärzeit $\rho = f_r$, Standardabweichung des weißen Rauschens $\sigma = 10 \mu V$, Dämpfungsfaktor für pseudo-adjazente Zellen $\kappa = 0.05$, Parameter für den Binomialfilter $b = \lfloor w/10 \rfloor$, Abstand für die Differenzen $d = \lfloor w/16 \rfloor$,

Parameter für den Rechteckfilter $u = \max\{1, \lfloor d/6 \rfloor\}$, Maximalfehler bei Spitzenschätzung $\varepsilon = \max\{1, \lfloor w/80 \rfloor\}$, Schwellenwerte für die Spitzen-Erkennung $\eta^- = \frac{-50}{3} \mu V$, $\eta^+ = \frac{50}{4} \mu V$, Fehlerfaktoren für Kanten- und Nachbarschaftsschätzung $\theta_1 = 0.1$, $\theta_2 = 0.2$. Abbildung 2.2.2 zeigt einige von auf diese Weise simulierte Aufzeichnungswerte.

n	m	f_r	$\bar{\eta}_m$	$\bar{\eta}_f$	\bar{t}	n	m	f_r	$\bar{\eta}_m$	$\bar{\eta}_f$	\bar{t}
64	64	20	0.012	0.072	8	100	100	20	0.014	0.073	12
64	64	25	0.006	0.030	10	100	100	25	0.006	0.033	16
64	64	40	0.004	0.004	11	100	100	40	0.003	0.003	18
64	64	100	0.002	0.002	50	100	100	100	0.002	0.003	78
64	128	20	0.019	0.060	8	100	200	20	0.023	0.065	13
64	128	25	0.009	0.026	11	100	200	25	0.010	0.028	17
64	128	40	0.006	0.002	12	100	200	40	0.007	0.001	19
64	128	100	0.005	0.001	50	100	200	100	0.005	0.000	79
64	192	20	0.042	0.048	9	100	300	20	0.057	0.049	14
64	192	25	0.020	0.024	11	100	300	25	0.025	0.022	18
64	192	40	0.024	0.001	13	100	300	40	0.033	0.001	20
64	192	100	0.012	0.000	51	100	300	100	0.016	0.000	80

Tab. 2.2.1: Diese Tabelle zeigt die durchschnittlichen relativen Anzahlen von fehlenden ($\bar{\eta}_m$) und falschen ($\bar{\eta}_f$) Nachbarschaften und die durchschnittliche Rekonstruktionszeit (\bar{t}) in Sekunden für 100 Durchläufe des Algorithmus bei einer simulierten Aufzeichnung über 10 s für jedes Tripel (n, m, f_r) , wobei n die Anzahl der Elektroden, m die Anzahl der Zellen und f_r die Aufzeichnungsfrequenz in kHz sind.

Die Ergebnisse und die durchschnittliche Rekonstruktionszeit (\bar{t} , angegeben in s) sind in Tabelle 2.2.1 zusammengefasst. In den Berechnungen betrugen die Durchschnitts- und Maximalgrade der Zellen ungefähr 2.3 beziehungsweise 6.3. Für $m = n$, $m = 2n$, $m = 3n$ betrugen die Durchschnitts- und Maximalgrade der Elektroden ungefähr 2.3, 4.6, 6.9 beziehungsweise 6.8, 11.1, 15.0. Die Berechnungen wurden auf einem PC mit einer Intel Core 2 Quad CPU mit 2.67 GHz und 8 GB RAM durchgeführt.

2.3 Spike-Sorting unter idealen Bedingungen

In diesem Abschnitt wollen wir ein paar theoretische Grundlagen dafür legen, wie man die Ansätze aus Abschnitt 2.2 zu einem Spike-Sorting-Verfahren erweitern kann. Sei

$$s_{i,1} < s_{i,2} < \dots < s_{i,p_i},$$

die unbekannte Pulsfolge von z_i und $d_{i,j}$ die Verzögerung von z_i nach e_j , falls $j \in N_i$ ist. Wir betrachten wieder die Spitzen

$$\pi_{j,1} < \pi_{j,2} < \dots < \pi_{j,q_j}, \quad j \in [n]. \quad (2.11)$$

Dabei gehen wir in diesem Abschnitt davon aus, dass diese ganze Zahlen sind, also in Zeiteinheiten angegeben sind und keine Messfehler durch Rauschen oder durch die Grobheit der Messung durch eine zu geringe Aufzeichnungsfrequenz auftreten. Das Ziel ist nun, den einzelnen Spitzen die Neuronen zuzuordnen, die sie erzeugt haben.

Nachfolgend beschreiben wir das etwas präziser. Wir erinnern noch einmal an die Definition der Nachbarschaft:

$$N_i = \{j \in [n] : z_i \text{ und } e_j \text{ sind adjazent}\}.$$

Für eine Normierung benötigen wir den *minimalen Nachbarindex*, der gegeben ist durch

$$m(z_i) = \min\{j : j \in N_i\}.$$

Wir nennen ein Neuron z_i *außergewöhnlich* falls seine Nachbarschaft nur aus einem Element besteht, also falls $|N_i| = 1$. Später werden wir die Konsequenzen der Existenz solcher Neuronen betrachten und sie gegebenenfalls ausschließen.

Um die Bezeichnungen zu vereinfachen, führen wir partielle Abbildungen ein. Wir erinnern daran, dass eine *partielle Abbildung von A nach B* eine Teilmenge F von $A \times B$ ist, sodass für jedes $a \in A$ höchstens ein $b \in B$ existiert mit $(a, b) \in F$. Statt der Bezeichnung $(a, b) \in F$ benutzen wir die üblichere Form $b = F(a)$. Weiterhin ist der *Definitionsbereich* von F gegeben durch

$$D(F) := \{a \in A : \exists b \in B : (a, b) \in F\}.$$

In unserem Fall sind die Mengen A und B Teilmengen der reellen Zahlen und können somit der Größe nach geordnet werden. Weiterhin nehmen wir an, dass A endlich ist. Das *kleinste Element des Definitionsbereichs von F* bezeichnen wir mit

$$m(F) := \min\{a : a \in D(F)\}.$$

Für die Rekonstruktion ist die folgende Definition wichtig, die eine Erweiterung der Nachbarschaft als Charakterisierung der Neuronen darstellt: Die Elektrode e_j sei in der Nachbarschaft des Neurons z_i . Die *Charakteristik von z_i bezüglich e_j* ist die partielle Abbildung $C_{i,j}$ von $[n]$ nach \mathbb{R} mit Definitionsbereich N_i , die durch

$$C_{i,j}(j') := d_{i,j'} - d_{i,j}, \quad j' \in N_i$$

gegeben ist. Die Differenz $d_{i,j'} - d_{i,j}$ kann als die *relative Verzögerung des Neurons z_i von Elektrode e_j zu Elektrode $e_{j'}$* interpretiert werden, die auch schon bei der Definition des Verzögerungsgraphen in Abschnitt 2.2.1 auftrat.

Die *normierte Charakteristik des Neurons z_i* ist die Charakteristik von z_i bezüglich der Elektrode aus der Nachbarschaft von z_i mit dem kleinsten Index, das heißt

$$C_i := C_{i,m(z_i)}.$$

Es gibt eine einfache Umwandlungsregel zwischen der Charakteristik des Neurons z_i bezüglich einer benachbarten Elektrode e_j und seiner normierten Charakteristik: Für alle $j, j' \in N_i$ gilt

$$\begin{aligned} C_{i,j}(j') &= C_i(j') - C_i(j), \\ C_i(j) &= -C_{i,j}(m(z_i)). \end{aligned}$$

Insbesondere unterscheiden sich die Charakteristiken $C_{i,j}$ und C_i nur durch eine additive Konstante, nämlich $C_i(j)$. Nun zeigen wir eine einfache Aussage über die Grenzen der Rekonstruktionsmöglichkeiten in unserem Modell.

Proposition 2.3.1. *Neuronen mit identischer normierter Charakteristik können im betrachteten Modell nicht unterschieden werden.*

Beweis. Zwei Neuronen sind genau dann ununterscheidbar, wenn sie dieselben Spitzen in den Aufzeichnungen der Elektroden produzieren können. Sei $C_i = C_{i'}$ für unterschiedliche Neuronen $z_i, z_{i'}$. Dann sind insbesondere die Nachbarschaften der beiden Neuronen identisch und es gilt $m(z_i) = m(z_{i'})$. Sei $d = d_{i,m(z_i)} - d_{i',m(z_{i'})}$. Wenn z_i zum Zeitpunkt u und $z_{i'}$ zum Zeitpunkt $u + d$ feuert, dann sind die Aufzeichnungszeiten an den Elektroden dieser Spikes völlig identisch. Sei e_j eine Elektrode in der Nachbarschaft der beiden Neuronen. Diese Elektrode zeichnet den Spike von z_i zum Zeitpunkt $u + d_{i,j}$ und von $z_{i'}$ zum Zeitpunkt $u + d + d_{i',j}$ auf. Aber es gilt $d_{i,j} = C_i(j) + d_{i,m(z_i)} = C_{i'}(j) + d_{i,m(z_i)} = d_{i',j} - d_{i',m(z_{i'})} + d_{i,m(z_i)} = d_{i',j} + d$ und folglich $u + d_{i,j} = u + d + d_{i',j}$. \square

Die Neuronen können aber natürlich durch andere Merkmale unterschieden werden, wie zum Beispiel das Aussehen der Wellenformen. Das wird in diesem Abschnitt jedoch nicht betrachtet. Es folgt, dass die absoluten Verzögerungen $d_{i,j}$ nicht rekonstruiert werden können, denn Neuronen, deren Verzögerungen sich nur um einen konstanten additiven Wert unterscheiden, besitzen dieselbe normierte Charakteristik. Daher können höchstens die relativen Verzögerungen rekonstruiert werden.

Als Konsequenz von Proposition 2.3.1 **identifizieren** wir die Neuronen mit ihren normierten Charakteristiken, das heißt Neuronen mit derselben normierten Charakteristik werden als identisch betrachtet. Genauso wie bei den Nachbarschaften bilden wir nun die *Menge der normierten Charakteristiken*

$$\mathcal{C} = \{C_i : i \in [m]\}.$$

Diese **unbekannte** Menge von normierten Charakteristiken ist das, was wir zunächst rekonstruieren wollen. Darauf aufbauend entwickeln wir dann ein Verfahren zum Spike-Sorting. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit nehmen wir im Folgenden an, dass alle C_i , $i \in [m]$, verschieden sind.

Für das Weitere wird der Verzögerungsgraph aus Abschnitt 2.2.1 wichtig. Insbesondere wollen wir noch mal die Definition der Instanz

$$I_{i,k} = \{(j, l) : j \in N_i \text{ und } \pi_{j,l} = s_{i,k} + d_{i,j}\}$$

angeben. Mit der Interpretation einer partiellen Abbildung als Menge von Paaren erhalten wir:

Proposition 2.3.2. *Sei $(j, l) \in I_{i,k}$. Dann gilt*

$$C_{i,j} = \{(j', \pi_{j',l'} - \pi_{j,l}) : (j', l') \in I_{i,k}\}.$$

Beweis. Nach Annahme ist $j \in N_i$ und $\pi_{j,l} = s_{i,k} + d_{i,j}$. Nun gilt nach Definition

$$\begin{aligned} \{(j', d_{i,j'} - d_{i,j}) : j' \in N_i\} &= \{(j', (s_{i,k} + d_{i,j'}) - (s_{i,k} + d_{i,j})) : j' \in N_i\} \\ &= \{(j', \pi_{j',l'} - \pi_{j,l}) : j' \in N_i \text{ und } \pi_{j',l'} = s_{i,k} + d_{i,j'}\} \\ &= \{(j', \pi_{j',l'} - \pi_{j,l}) : (j', l') \in I_{i,k}\}. \end{aligned}$$

□

In konkreten Beispielen ist $I_{i,k}$ oft sogar eine maximale *Clique*, induziert also einen maximalen vollständigen Teilgraphen des Verzögerungsgraphen G . Wir erinnern daran, dass

$$R_{j,l} = \{\langle i, k \rangle : (j, l) \in I_{i,k}\}$$

die Ursachenmenge für (j, l) ist, die als die Menge der Spikes $s_{i,k}$ interpretiert werden kann, die dieselbe Spitze $\pi_{j,l}$ erzeugen. Die Menge $D(R_{j,l})$ ist somit die Indexmenge der Neuronen, die die Spitze erzeugen. Diese Neuronen besitzen eine normierte Charakteristik und alle diese Charakteristiken werden in der folgenden *charakteristischen Menge von (j, l)* zusammengefasst:

$$\mathcal{C}_{j,l} := \{C_i \in \mathcal{C} : i \in D(R_{j,l})\}.$$

Die Abbildung $\gamma : V \rightarrow 2^{\mathcal{C}}$, die den Knoten (j, l) auf seine charakteristische Menge abbildet, das heißt

$$\gamma(j, l) := \mathcal{C}_{j,l}, \quad (j, l) \in V,$$

nennen wir *charakteristische Zuordnung*.

Wir wollen noch einmal die folgenden Basisannahmen auflisten, die im Folgenden weiter gültig sind:

Annahme 2.3.1. Jedes Neuron z_i erzeugt mindestens $\nu \geq 2$ Spikes, also

$$\nu \leq p_i \quad \forall i \in [m].$$

Annahme 2.3.2. Alle Absolutbeträge der relativen Verzögerungen sind nach oben beschränkt durch $\delta > 0$, das heißt

$$\delta \geq |d_{i,j_1} - d_{i,j_2}| \quad \forall i \in [m], \forall j_1, j_2 \text{ mit } e_{j_1}, e_{j_2} \in N_i.$$

Außerdem arbeiten wir zunächst mit der folgenden Annahme, zu der wir später Abweichungen erlauben, das heißt wir erlauben $\epsilon = 1$.

Annahme 2.3.3. Jedes Neuron hat elektrischen Kontakt zu mindestens $\epsilon \geq 2$ Elektroden, das heißt

$$|N_i| \geq \epsilon \quad \forall i \in [m].$$

Wenn wir außergewöhnliche Neuronen erlauben, also Neuronen, die nur zu einer Elektrode elektrischen Kontakt besitzen, könnte theoretisch jede Spitze durch solche außergewöhnlichen Neuronen erzeugt worden sein und nichts wäre zu rekonstruieren.

Nun sind wir in der Lage, das in diesem Kapitel betrachtete *Rekonstruktionsproblem* zu formulieren:

Problem 2.3.1. Gegeben seien die Spitzen $\pi_{j,1} < \dots < \pi_{j,q_j}$ für jede Elektrode e_j , $j \in [n]$, die untere Schranke ν für die Anzahl der Spikes von jedem Neuron, die obere Schranke δ für alle relativen Verzögerungen und die untere Schranke ϵ für die Anzahl an Elektroden, zu denen jedes Neuron elektrischen Kontakt besitzt. Bestimme die Menge \mathcal{C} der normierten Charakteristiken sowie die charakteristische Zuordnung γ .

Wir erinnern daran, dass die Charakteristiken die Neuronen repräsentieren und dass der Definitionsbereich der Charakteristik die Nachbarschaftsmenge des entsprechenden Neurons darstellt. Außerdem kann die Bestimmung der charakteristischen Zuordnung als die Lösung des Spike-Sorting-Problems interpretiert werden, da γ für jede Spitze beschreibt, welche Neuronen diese erzeugt haben.

Es wird sich zeigen, dass nur mit ein paar weiteren Annahmen das Rekonstruktionsproblem exakt gelöst werden kann. Somit sind approximative Lösungen von Interesse. Um die Qualität solcher Lösungen einzuschätzen definieren wir ein paar weitere Fehlermaße:

Sei $\tilde{\mathcal{C}}$ und $\tilde{\gamma}$ eine geschätzte Lösung für das Problem 2.3.1. Dann ist der *relative Fehler der normierten Charakteristiken* definiert durch

$$\zeta := \frac{|\mathcal{C} \setminus \tilde{\mathcal{C}}| + |\tilde{\mathcal{C}} \setminus \mathcal{C}|}{|\mathcal{C}|} \quad (2.12)$$

und der *relative Zuordnungsfehler* wird definiert durch

$$\Gamma := \frac{|\{(j, l) : \gamma(j, l) \neq \tilde{\gamma}(j, l)\}|}{|V|}. \quad (2.13)$$

Im Folgenden setzen wir den geschätzten Verzögerungsgraphen \tilde{G} als gegeben voraus, der wie in Abschnitt 2.2.1 beschrieben allerdings mit $\delta = d_{\max}$ statt $\delta = d_{\max} + 2\varepsilon$ konstruiert wird. Die dortigen Betrachtungen mit der Fehlerschranke ε sind für dieses Kapitel irrelevant, da wir nach Annahme hier keine Messfehler betrachten.

Wir führen die folgenden Definitionen und Notationen (mit Tilde) für den geschätzten Verzögerungsgraphen \tilde{G} ein, da sie hauptsächlich für diesen benutzt werden. Identische Definitionen und Notationen (ohne Tilde) gelten aber für den Verzögerungsgraphen G .

Sei $(j, l) \in V$. Die *offenen und abgeschlossenen Nachbarschaften* (j, l) werden wie gewöhnlich durch

$$\tilde{N}(j, l) := \{(j', l') : \{(j, l), (j', l')\} \in \tilde{E}\} \text{ und } \tilde{N}[j, l] := \tilde{N}(j, l) \cup \{(j, l)\}$$

definiert. Der *Nachbarschaftsgraph* von (j, l) ist der Graph, der durch $\tilde{N}[j, l]$ induziert wird, also der Graph $\tilde{G}[j, l] = \tilde{G}[\tilde{N}[j, l]]$.

Mit den relativen Verzögerungen im Hinterkopf definieren wir die *charakteristische Nachbarschaft* von $(j, l) \in V$ durch

$$\tilde{U}[j, l] := \{(j', \pi_{j', l'} - \pi_{j, l}) : (j', l') \in \tilde{N}[j, l]\}.$$

Proposition 2.3.3. *Falls $C_i \in \mathcal{C}_{j, l}$ ist, dann gilt $C_{i, j} \subseteq \tilde{U}[j, l]$.*

Beweis. Nach Definition und Annahme ist C_i die normierte Charakteristik vom Neuron z_i , welches die Spitze (j, l) durch einen Spike $\langle i, k \rangle$ erzeugt hat. Das bedeutet, dass (j, l) in der k -ten Instanz $I_{i, k}$ von z_i enthalten ist. Mit der Proposition 2.2.2 und der Tatsache, dass jede Kante des Verzögerungsgraphen auch im geschätzten Verzögerungsgraphen enthalten ist, gilt $I_{i, k} \subseteq \tilde{N}[j, l]$. Schließlich gilt wegen Proposition 2.3.2, $C_{i, j} = \{(j', \pi_{j', l'} - \pi_{j, l}) : (j', l') \in I_{i, k}\} \subseteq \{(j', \pi_{j', l'} - \pi_{j, l}) : (j', l') \in \tilde{N}[j, l]\} = \tilde{U}[j, l]$. \square

Wir passen die Definition der Charakteristik von Neuronen jetzt an partielle Abbildungen an, da dies im weiteren Verlauf nützlich sein wird: Sei F eine partielle Abbildung von $[n]$ nach \mathbb{R} . Für $j \in D(F)$ definieren wir die *zugehörige partielle Abbildung* F_j bezüglich j wie folgt:

$$F_j(j') := F(j') - F(j), \quad j' \in D(F).$$

Für zwei partielle Abbildungen, die sich nur um eine additive Konstante unterscheiden, sind die zugehörigen partiellen Abbildungen bezüglich j identisch. Falls $F = F_{m(F)}$ ist, also $F(m(F)) = 0$ gilt, nennen wir die partielle Abbildung F *normiert*.

Die nächste Definition behandelt die Frage, ob eine partielle Abbildung in die Verzögerungsstruktur im geschätzten Verzögerungsgraphen an einem bestimmten Knoten „hineinpasst“. Wir sagen, dass eine partielle Abbildung F von $[n]$ nach \mathbb{R} *partiell zulässig für (j, l)* ist, wenn die zugehörige partielle Abbildung bezüglich j (aufgefasst als Menge von Paaren) die folgende Bedingung erfüllt: $F_j \subseteq \tilde{U}[j, l]$. Für solche F definieren wir ihre *zugehörige Knotenmenge* durch

$$\tilde{I}_F[j, l] := \{(j', l') \in \tilde{N}[j, l] : j' \in D(F) \text{ und } F_j(j') := \pi_{j', l'} - \pi_{j, l}\}.$$

Dabei ist zu beachten, dass $|\tilde{I}_F[j, l]| = |D(F)|$ gilt, da partielle Zulässigkeit für jedes $j' \in D(F)$ aussagt, dass es genau ein l' gibt, sodass $(j', l') \in \tilde{N}[j, l]$ und $F_j(j') = \pi_{j', l'} - \pi_{j, l}$ gelten. Aufbauend auf Proposition 2.2.2 und Annahme 2.3.3 nennen wir eine partielle Abbildung F von $[n]$ nach \mathbb{R} *zulässig für (j, l)* falls F partiell zulässig für (j, l) ist und $\tilde{I}_F[j, l]$ einen vollständigen Teilgraphen von $\tilde{G}[j, l]$ an mindestens ϵ Knoten induziert. In diesem Fall nennen wir die Menge $\tilde{I}_F[j, l]$ *Instanz* von F . Außerdem gilt für zwei partielle Abbildungen, die sich nur um eine Konstante unterscheiden, dass die erste genau dann zulässig für (j, l) ist, wenn die zweite dies auch ist.

Proposition 2.3.4. *Falls F zulässig für (j, l) ist und falls $(j', l') \in \tilde{I}_F[j, l]$ gilt, dann ist F auch zulässig für (j', l') und es gilt $\tilde{I}_F[j, l] = \tilde{I}_F[j', l']$.*

Beweis. Wir zeigen zunächst, dass F partiell zulässig für (j', l') ist. Nach Annahme gilt $(j', l') \in \tilde{N}[j, l]$, $j' \in D(F)$ und $F_j(j') = \pi_{j', l'} - \pi_{j, l}$. Wir müssen zeigen, dass $F_{j'} \subseteq \tilde{U}[j', l']$, also $(j'', F_{j'}(j'')) \in \tilde{U}[j', l']$ für jedes $j'' \in D(F)$. Demzufolge betrachten wir ein beliebiges aber festes $j'' \in D(F)$. Da F partiell zulässig für (j, l) ist, gilt $(j'', F_j(j'')) \in \tilde{U}[j, l]$, also gibt es ein l'' sodass $(j'', l'') \in \tilde{N}[j, l]$ und $F_j(j'') = \pi_{j'', l''} - \pi_{j, l}$. Dies impliziert $(j'', l'') \in \tilde{I}_F[j, l]$. Weiter gilt nach Annahme, dass diese Menge einen vollständigen Teilgraphen von \tilde{G} induziert und da auch $(j', l') \in \tilde{I}_F[j, l]$ ist, gilt somit $(j'', l'') \in \tilde{N}[j', l']$ und außerdem $(j'', \pi_{j'', l''} - \pi_{j', l'}) \in \tilde{U}[j', l']$. Zudem gilt $\pi_{j'', l''} - \pi_{j', l'} = (\pi_{j'', l''} - \pi_{j, l}) - (\pi_{j', l'} - \pi_{j, l}) = F_j(j'') - F_j(j') = (F(j'') - F(j)) - (F(j') - F(j)) = F(j'') - F(j') = F_{j'}(j'')$. Demzufolge ist $(j'', F_{j'}(j'')) \in \tilde{U}[j', l']$.

Aus den letzten Zeilen folgt zusätzlich, dass auch jedes $(j'', l'') \in \tilde{I}_F[j, l]$ zu $\tilde{I}_F[j', l']$ gehört, was $\tilde{I}_F[j, l] \subseteq \tilde{I}_F[j', l']$ ergibt, und mit $|\tilde{I}_F[j, l]| = |\tilde{I}_F[j', l']| = |D(F)|$ folgt schließlich $\tilde{I}_F[j, l] = \tilde{I}_F[j', l']$. Insbesondere induziert $\tilde{I}_F[j', l']$ wie $\tilde{I}_F[j, l]$ einen vollständigen Teilgraphen von \tilde{G} und somit ist F zulässig für (j', l') . \square

Proposition 2.3.5. *Falls $C_i \in \mathcal{C}_{j, l}$ gilt, dann ist $C_{i, j}$, und somit auch C_i , zulässig für (j, l) und $I_{i, k}$ ist eine Instanz von C_i für jedes $k \in [p_i]$.*

Beweis. Der Beweis folgt direkt aus den Propositionen 2.2.2 und 2.3.3. \square

Sei

$$\tilde{\mathcal{I}}_F = \{\tilde{I}_F[j, l] : (j, l) \in V \text{ und } F \text{ ist zulässig für } (j, l)\} \quad (2.14)$$

die Instanzenmenge von F .

Annahme 2.3.1 legt die folgende Definition nahe: Eine partielle Abbildung F von $[n]$ nach \mathbb{R} wird *zulässig für die Elektrode e_j* genannt, falls $j \in D(F)$ und $|\tilde{\mathcal{I}}_F| \geq \nu$. Außerdem wird sie *zulässig* genannt, falls sie für mindestens eine Elektrode e_j zulässig ist.

In Abbildung 2.3.1 werden Beispiele der eben eingeführten Konzepte gezeigt.

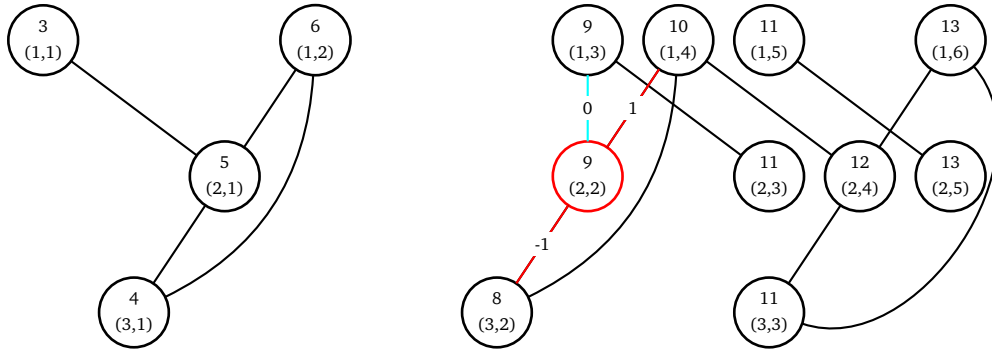


Abb. 2.3.1: Die charakteristische Nachbarschaft $\tilde{U}[2, 2] = \{(1, 0), (1, 1), (2, 0), (3, -1)\}$ und eine partielle Abbildung $F = \{(1, 1), (2, 0), (3, -1)\}$, die in diese Nachbarschaft hineinpasst, also zulässig für $(2, 2)$ ist, sind farblich hervorgehoben. Diese partielle Abbildung ist auch zulässig (bei gegebenen Parametern $\nu = 3, \epsilon = 2, \delta = 2$), da die folgenden 3 Instanzen, $\tilde{I}_F[2, 1] = \{(1, 2), (2, 1), (3, 1)\}$, $\tilde{I}_F[2, 2] = \{(1, 4), (2, 2), (3, 2)\}$ und $\tilde{I}_F[2, 4] = \{(1, 6), (2, 4), (3, 3)\}$ existieren und diese Instanzen auch mindestens die Größe 2 besitzen.

Sei $\tilde{\mathcal{F}}$ die Menge aller partiellen Abbildungen von $[n]$ nach \mathbb{R} , die normiert und zulässig sind. Wir nennen $\tilde{\mathcal{F}}$ die *Menge aller Charakteristikkandidaten*. Außerdem nennen wir die Menge $\tilde{\mathcal{F}}_{j,l}$ aller Charakteristikkandidaten, die zulässig für (j, l) sind, die *Menge aller Charakteristikkandidaten für (j, l)* .

Proposition 2.3.6. *Es gilt*

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &\subseteq \tilde{\mathcal{F}}, \\ \mathcal{C}_{j,l} &\subseteq \tilde{\mathcal{F}}_{j,l}. \end{aligned}$$

Beweis. Die Behauptungen ergeben sich einfach aus der Proposition 2.3.5 und der Annahme 2.3.1. \square

Proposition 2.3.7. *Falls $\mathcal{C} \neq \tilde{\mathcal{F}}$ ist, dann kann das Rekonstruktionsproblem nicht eindeutig gelöst werden.*

Beweis. Wir können für jeden Charakteristikkandidaten F ein künstliches Neuron einführen, das diesen Charakteristikkandidaten als normierte Charakteristik besitzt, das heißt, seine relativen Verzögerungen entsprechen exakt denen der Charakteristik und die Elektroden $e_j, j \in D(F)$, bilden die Nachbarschaft des Neurons. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit setzen wir die Verzögerung jedes künstlichen Neurons zur Elektrode $e_{m(F)}$ auf 0. Seien $\tilde{I}_F[m(F), l_1], \dots, \tilde{I}_F[m(F), l_h]$ die Instanzen von F . Wenn das künstliche Neuron genau zu den Zeitpunkten $\pi_{m(F), l_1}, \dots, \pi_{m(F), l_h}$ feuert, dann stimmen die Instanzen des Neurons mit denen von F überein. Demzufolge würden die künstlichen Neuronen nur Spitzen erzeugen, die sowieso schon von den Elektroden aufgezeichnet wurden und sie würden sogar alle Spitzen der Elektroden erzeugen, da wegen Proposition 2.3.6 die normierten Charakteristiken der realen Neuronen $z_i, i \in [m]$, ebenso Charakteristikkandidaten sind und allein diese schon alle Spitzen erzeugen. \square

Im Folgenden identifizieren wir vollständige Teilgraphen mit ihren Knotenmengen. Für einen vollständigen Teilgraphen K von \tilde{G} , der einen bestimmten Knoten (j, l) enthält, definieren wir seine *zugehörige Charakteristik* $F_{K,j}$ bezüglich j als eine partielle Abbildung von $[n]$ nach \mathbb{R} wie folgt: Sei der Definitionsbereich $D(F_{K,j})$ die Menge der ersten Komponenten der Knotennamen (die Paare von ganzen Zahlen sind) von K und sei

$$F_{K,j}(j') := \pi_{j',l'} - \pi_{j,l}, \quad (j', l') \in K.$$

Es gibt für jedes $j' \in D(F_{K,j})$ genau ein l' , sodass $(j', l') \in K$ ist, da zwei unterschiedliche Paare mit derselben ersten Komponente nicht adjazent sind. Die *zugehörige normierte Charakteristik* F_K ist dann gegeben durch

$$F_K(j') := F_{K,j}(j') - F_{K,j}(m(F_{K,j})),$$

das heißt F_K unterscheidet sich von $F_{K,j}$ nur durch eine Konstante, sodass der Wert von F_K für das kleinste Element des Definitionsbereichs 0 ist. Außerdem gilt bei gegebener normierter Charakteristik F_K , dass die partielle Abbildung $F_{K,j}$ die zugehörige partielle Abbildung bezüglich j ist.

Nach Definition ist $F_{K,j}$ zulässig für (j, l) und K ist die zugehörige Knotenmenge der partiellen Abbildung $F_{K,j}$, also $K = \tilde{I}_{F_{K,j}}[j, l]$.

Da jeder Charakteristikkandidat F zumindest für einen Knoten (j, l) zulässig sein muss (eigentlich sogar für mindestens ν Knoten), ist es vernünftig, für alle $(j, l) \in V$ die vollständigen Teilgraphen K von $\tilde{G}[j, l]$, die (j, l) und mindestens $\epsilon - 1$ andere Knoten enthalten, zusammen mit ihrer zugehörigen Charakteristik $F_{K,j}$ aufzulisten.

Falls diese partielle Abbildung $F = F_{K,j}$ mindestens ν -mal auftaucht, wenn l alle Zahlen aus $[q_j]$ durchläuft, dann ist ihre normierte Version nach Definition ein Charakteristikkandidat. Hier benutzen wir wieder Multimengen \mathcal{M} , um die Häufigkeit

einer solchen partiellen Abbildung herauszufinden. Dieser Charakteristikkandidat wird nicht nur einmal sondern $|K|$ -mal gefunden, nämlich für jeden Knoten aus K . Die Menge der Charakteristikkandidaten kann mittels Algorithmus 3 gefunden werden.

Algorithmus 3 Bestimmung aller Charakteristikkandidaten

Input: Geschätzter Verzögerungsgraph $\tilde{G} = (V, \tilde{E})$.
 $\tilde{\mathcal{F}} = \emptyset$.
for all $j \in [n]$ **do**
 $\mathcal{M} := \emptyset$.
 for all $l \in [q_j]$ **do**
 for all Vollständigen Teilgraphen K von $\tilde{G}[j, l]$, die (j, l) und mindestens $\epsilon - 1$ andere Knoten enthalten **do**
 Bestimme die zugehörige normierte Charakteristik F_K .
 Füge F_K zu \mathcal{M} hinzu.
 end for
 end for
 for all $F \in \mathcal{M}$ **do**
 if $\mu_{\mathcal{M}}(F) \geq \nu$ **then**
 $\tilde{\mathcal{F}} := \tilde{\mathcal{F}} \cup \{F\}$.
 end if
 end for
end for

Das Durchlaufen aller vollständigen Teilgraphen kann mittels eines Backtracking-Verfahrens realisiert werden. Aus Proposition 2.3.7 und Algorithmus 3 folgt sofort:

Satz 2.3.1. *Die Menge der normierten Charakteristiken kann genau dann eindeutig rekonstruiert werden, wenn $\mathcal{C} = \tilde{\mathcal{F}}$ ist.*

Dieser Satz ist nur von theoretischem Interesse, da \mathcal{C} unbekannt ist und somit die Gleichheit $\mathcal{C} = \tilde{\mathcal{F}}$ nicht überprüft werden kann.

Die Schätzung der charakteristischen Zuordnung, also der Zuordnung der Neuronen zu den aufgezeichneten Spitzen, kann wie folgt durchgeführt werden: Anstatt der korrekten Zuordnung $\gamma : V \rightarrow 2^{\mathcal{C}}$ bestimmen wir eine *geschätzte charakteristische Zuordnung* $\tilde{\gamma} : V \rightarrow 2^{\tilde{\mathcal{F}}}$, wobei

$$\tilde{\gamma}(j, l) = \tilde{F}_{j, l}, \quad (j, l) \in V.$$

Etwas formaler ist dies in Algorithmus 4 beschrieben.

Sogar im Falle von $\mathcal{C} = \tilde{\mathcal{F}}$ kann die charakteristische Zuordnung nicht eindeutig bestimmt werden. Zum Beispiel kann das vorkommen, wenn ein Neuron z_i mehr

Algorithmus 4 Bestimmung der geschätzten charakteristischen Zuordnung

Input: Geschätzter Verzögerungsgraph $\tilde{G} = (V, \tilde{E})$ und Menge der Charakteristikkandidaten $\tilde{\mathcal{F}}$.

```

for all  $(j, l) \in V$  do
   $\tilde{\gamma}(j, l) = \emptyset$ .
  for all  $F \in \tilde{\mathcal{F}}$  do
    if  $F$  ist zulässig für  $(j, l)$  then
       $\tilde{\gamma}(j, l) := \tilde{\gamma}(j, l) \cup \{F\}$ .
    end if
  end for
end for

```

als ν -mal feuert und die aufgezeichneten Spitzen eines Spikes $\langle i, k \rangle$ alle auch durch andere Spikes erzeugt werden, also falls $|R_{j,l}| \geq 2$ für alle $(j, l) \in I_{i,k}$ gilt, dann kann nicht bestimmt werden, ob der Spike $\langle i, k \rangle$ wirklich stattgefunden hat oder nicht. Außerdem ist die Bestimmung aller vollständigen Teilgraphen zeitaufwändig und sie erzeugt eine große Menge von Charakteristikkandidaten. Deswegen benötigen wir weitere Annahmen und auch heuristische Argumente und Algorithmen.

2.4 Heuristische Verbesserungsmöglichkeiten

Nach der Proposition 2.2.2 haben wir schon erwähnt, dass es unwahrscheinlich ist, dass eine Instanz eines Neurons keinen maximal vollständigen Teilgraphen im geschätzten Verzögerungsgraphen bildet: Andernfalls werden alle zusätzlichen Kanten durch andere Neuronen erzeugt und es ist unwahrscheinlich, dass die zugehörigen Zeitdifferenzen wegen derer die Kanten in den Graphen aufgenommen wurden gerade mit den relativen Verzögerungen der anderen Neuronen übereinstimmen. Aus demselben Grund kann man erwarten, dass fast jede Instanz eines Neurons eine maximale Clique im Verzögerungsgraphen und auch im geschätzten Verzögerungsgraphen ist. In unserer Anwendung für MEAs sind die Nachbarschaftsgraphen $\tilde{G}[j, l]$ eher klein (nicht mehr als 10 Knoten) und somit kann man erwarten, dass man die richtige Clique mit einem Greedy-Algorithmus findet. Wir setzen das um, indem wir iterativ den Knoten mit dem größten Grad aus dem verbleibenden Graphen auswählen und ihn zur Clique hinzufügen, siehe Algorithmus 5 (vergleiche [48, p. 48]):

Nun muss der Algorithmus 3 wie folgt modifiziert werden: Lösche die for-Schleife, die alle vollständigen Teilgraphen umfasst und füge Algorithmus 5 an dieser Stelle ein, um nur einen vollständigen Teilgraphen K zusammen mit seiner zugehörigen normierten Charakteristik F_K zu bestimmen. Es ist zu beachten, dass wir nicht überprüfen, ob die Größe der Greedy-Clique mindestens ϵ beträgt. Da es in realen

Algorithmus 5 Greedy-Cliquensuche im Nachbarschaftsgraphen

Input: (j, l) und $\tilde{G}[j, l]$.

Initialisiere $K := \{(j, l)\}$ und $H := \tilde{G}[j, l] - \{(j, l)\}$.

while $H \neq \emptyset$ **do**

 Finde einen Knoten (j', l') mit größtem Grad in H .

$K := K \cup \{(j', l')\}$.

 Ersetze H durch den Teilgraphen von H , der durch die Nachbarn von (j', l') in H induziert wird.

end while

Situationen vorkommen kann, dass ein Neuron nur zu einer Elektrode elektrischen Kontakt besitzt, benutzen wir die Annahme 2.3.3 in diesem heuristischen Ansatz nicht. Allerdings ist es möglich, dass die Greedy-Clique K nicht die richtige Clique ist, das heißt, dass ihre Knotenmenge keine Instanz des zugehörigen Neurons ist. Da solche Fehler durchaus auftreten können, setzen wir in der zweiten for-Schleife von Algorithmus 3 nicht voraus, dass die zugehörige Charakteristik mindestens ν -mal vorkommt, sondern nur mindestens $\nu/2$ -mal. Der Faktor $\frac{1}{2}$ ist hier recht willkürlich gewählt, er könnte auch durch einen anderen Wert im Intervall $(0, 1)$ ersetzt werden, aber $\frac{1}{2}$ hat sich in praktischen Tests bewährt. Wir können relativ sicher sein, dass die normierte Charakteristik jedes Neurons z_i wirklich zur Menge der Charakteristikkandidaten hinzugefügt wird, da Algorithmus 3 alle Knoten aus V durchläuft, insbesondere alle Knoten (j, l) mit $j \in N_i$, und es ist wahrscheinlich, dass für wenigstens ein solches j der Greedy-Algorithmus mindestens $\nu/2$ -mal eine Instanz des Neurons z_i findet und somit wird die zugehörige Charakteristik mindestens $\nu/2$ -mal zu \mathcal{M} und deswegen auch zu $\tilde{\mathcal{F}}$ hinzugefügt. Daher wird wahrscheinlich keine normierte Charakteristik eines Neurons übersehen werden. Allerdings kann es sein, dass falsche Charakteristikkandidaten (also solche, die keine normierten Charakteristiken eines Neurons sind) gefunden werden. Deswegen überprüfen wir, ob alle bisher gefundenen Charakteristikkandidaten für mindestens ν Knoten an einer Elektrode zulässig sind. Wenn dies nicht der Fall ist, wird der Kandidat gelöscht. Wegen Proposition 2.3.4 braucht diese Überprüfung nur für ein beliebiges Element j des Definitionsbereichs des Charakteristikkandidaten durchgeführt werden. Wir nehmen hier $m(F)$, also das kleinste Element des Definitionsbereichs. Für den späteren Einsatz bestimmen wir hier nebenbei die *Zulässigkeitsmenge von F* , die wie folgt definiert ist: $A_F = \{l \in q_{m(F)} : F \text{ ist zulässig für } (m(F), l)\}$. Während dieses Zulässigkeitstests müssen die Instanzen $\tilde{I}_F[m(F), l]$ bestimmt werden. Es ist hilfreich, diese Mengen für die nächsten Schritte zu speichern, allerdings geben wir dies in der Beschreibung des Algorithmus nicht explizit an, um die Lesbarkeit zu erleichtern. Der modifizierte Algorithmus ist in Algorithmus 6 zusammengefasst.

Algorithmus 6 Modifizierte Bestimmung aller Charakteristikkandidaten**Input:** Geschätzter Verzögerungsgraph $\tilde{G} = (V, \tilde{E})$. $\tilde{\mathcal{F}} = \emptyset$.**for all** $j \in [n]$ **do** $\mathcal{M} := \emptyset$.**for all** $l \in [q_j]$ **do**Bestimme eine Greedy-Clique K in $\tilde{G}[j, l]$ mittels Algorithmus 5.Bestimme die zugehörige normierte Charakteristik F_K .Füge F_K zu \mathcal{M} hinzu.**end for****for all** $F \in \mathcal{M}$ **do****if** $\mu_{\mathcal{M}}(F) \geq \nu/2$ **then** $\tilde{\mathcal{F}} := \tilde{\mathcal{F}} \cup \{F\}$.**end if****end for****end for****for all** $F \in \tilde{\mathcal{F}}$ **do**Bestimme $A_F := \{l \in [q_{m(F)}] : F \text{ ist zulässig für } (m(F), l)\}$.**if** $|A_F| < \nu$ **then** $\tilde{\mathcal{F}} := \tilde{\mathcal{F}} \setminus \{F\}$.**end if****end for**

Die Bestimmung der zugehörigen geschätzten charakteristischen Zuordnung kann wieder mittels Algorithmus 4 durchgeführt werden. Allerdings kann dies deutlich beschleunigt werden, wenn die Zulässigkeitsmengen benutzt werden, siehe Algorithmus 7.

Am Ende des vorangegangenen Unterabschnitts haben wir schon erwähnt, dass es Uneindeutigkeiten gibt, wenn alle aufgezeichneten Spitzen eines Spikes $\langle i, k \rangle$ auch von anderen Spikes erzeugt werden. Allerdings ist solche eine Situation eher unwahrscheinlich. Für alle $(j, l) \in V$ besitzt die Ursachenmenge von (j, l) dieselbe Größe wie die charakteristische Menge von (j, l) , also ist $|R_{j,l}| = |\mathcal{C}_{j,l}|$. Das führt zur folgenden Definition: Ein Knoten (j, l) wird *einfach* bezüglich γ (beziehungsweise $\tilde{\gamma}$) genannt, falls $|\gamma(j, l)| = 1$ (beziehungsweise $|\tilde{\gamma}(j, l)| = 1$ ist). Eine Instanz $I_{i,k}$ des Neurons z_i (beziehungsweise eine Instanz $\tilde{I}_F[j, l]$ eines Charakteristikkandidaten F) nennen wir *redundant* bezüglich γ (beziehungsweise $\tilde{\gamma}$), falls sie keinen einfachen Knoten bezüglich γ (beziehungsweise $\tilde{\gamma}$) enthält. Andernfalls nennen wir sie *nicht redundant*. Abbildung 2.4.1 gibt ein Beispiel einer redundanten Instanz.

Bei der Aufzeichnung neuronaler Signale kann beispielsweise durch sogenann-

Algorithmus 7 Beschleunigte Bestimmung der geschätzten charakteristischen Zuordnung

Input: $\tilde{G} = (V, \tilde{E})$, $\tilde{\mathcal{F}}$ und $\{A_F : F \in \tilde{\mathcal{F}}\}$.

```

for all  $(j, l) \in V$  do
     $\tilde{\gamma}(j, l) = \emptyset$ .
end for
for all  $F \in \tilde{\mathcal{F}}$  do
    for all  $l \in A_F$  do
        for all  $(j', l') \in \tilde{I}_F[m(F), l]$  do
             $\tilde{\gamma}(j', l') := \tilde{\gamma}(j', l') \cup \{F\}$ .
        end for
    end for
end for
    
```

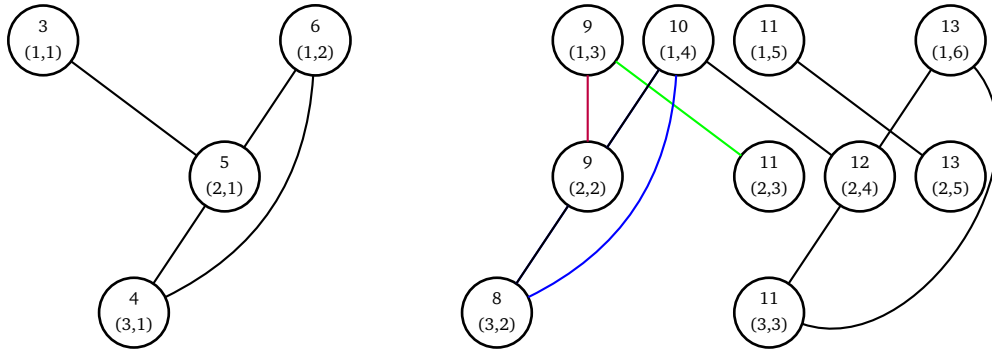


Abb. 2.4.1: Wenn $I_1 = \{(1, 3), (2, 2)\}$, $I_2 = \{(1, 3), (2, 3)\}$ und $I_3 = \{(1, 4), (2, 2), (3, 2)\}$, dargestellt durch die Kanten zwischen den zugehörigen Knoten, Instanzen sind, dann ist I_1 redundant bezüglich $\tilde{\gamma}$ da sowohl $(1, 3)$ als auch $(2, 2)$ nicht einfach bezüglich $\tilde{\gamma}$ sind.

te Bursts von Neuronen eine hohe Dichte von Spitzen, also viele Aufzeichnungen von Spikes innerhalb kurzer Zeit, auftreten. Dabei ist es wahrscheinlich, dass in der Rekonstruktionsheuristik Verzögerungen zwischen Spike-Records unterschiedlicher Spikes häufig auftreten und somit möglicherweise redundante Instanzen erzeugen. Redundante Instanzen sind zur Ursachenerklärung prinzipiell überflüssig, wobei es jedoch auch in seltenen Fällen vorkommen kann, dass die Instanz trotz Redundanz eine reale Ursache hat, also die Aufzeichnungen eines Spikes repräsentiert. Wahrscheinlicher ist jedoch, dass die Instanz ein zufälliges Artefakt ist und somit gelöscht werden kann. Man ist also daran interessiert, Instanzenmengen ohne redundante Instanzen zu finden, die jedoch noch alle Knoten überdecken und somit alle Spike-Records erklären. Mathematisch ergibt sich damit folgendes Problem, das unter dem Namen „(Minimum-)Set-Cover-Problem“ bekannt ist.

Problem 2.4.1. Gegeben sei eine Menge V und ein Mengensystem \mathcal{S} über der Menge V , wobei $\bigcup_{S \in \mathcal{S}} S = V$. Gesucht ist eine Teilmenge $\mathcal{R} \subseteq \mathcal{S}$ minimaler Mächtigkeit mit $\bigcup_{R \in \mathcal{R}} R = V$.

Das zu diesem Optimierungsproblem gehörende Entscheidungsproblem fragt, ob es zu einem $k \in \mathbb{N}$ eine Überdeckung $\mathcal{R} \subseteq \mathcal{S}$ von V mit $|\mathcal{R}| \leq k$ gibt. Dies kann dahingehend erweitert werden, dass man eine Gewichtsfunktion $c : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}$ definiert und dann eine Teilmenge \mathcal{R} mit minimalem Gewicht sucht. Das ist dann das „Minimum-Weight-Set-Cover-Problem“. Das Ausgangsproblem entspricht dann dem Spezialfall, dass jede Menge $S \in \mathcal{S}$ das Gewicht 1 besitzt. In unserem Anwendungsfall ist das V aus dem Problem die Knotenmenge des Verzögerungsgraphen und \mathcal{S} ist die Menge aller Instanzen von geschätzten Charakteristiken $C \in \mathcal{C}'$, also $\mathcal{S} = \bigcup_{C \in \mathcal{C}'} \mathcal{I}_C$. Wir erinnern daran, dass \mathcal{I}_C die Instanzenmenge der geschätzten Charakteristik C ist, siehe (2.14). Wir bemerken noch, dass wir zwischen einer Minimum-Lösung, also solch einer, die im obigen Problem gesucht wird, und einer minimalen Lösung unterscheiden. Eine minimale Lösung ist ein Mengensystem $\mathcal{R} \subseteq \mathcal{S}$ mit $\bigcup_{R \in \mathcal{R}} R = V$, das jedoch nach Entfernen einer beliebigen Menge aus \mathcal{R} nicht mehr V überdeckt. Die Größe einer Minimum-Überdeckung ist eine nur von der Probleminstanz abhängige eindeutig bestimmte Zahl, wohingegen minimale Überdeckungen unterschiedliche Größen besitzen können. Minimum-Lösungen sind klarerweise minimal, allerdings bedeutet die Redundanzfreiheit einer Instanzenteilmenge \mathcal{R} , die V überdeckt, nur, dass sie eine minimale Lösung ist. Damit führt sequentielles Entfernen von redundanten Instanzen nicht unbedingt zu einer angestrebten Minimum-Lösung. Wenn wir voraussetzen, dass für alle $S \in \mathcal{S}$ die Ungleichung $|S| \leq 2$ gilt, so können wir V als Knotenmenge und die zweielementigen Mengen als Kanten auffassen. Wir erhalten dafür eine optimale Lösung indem wir zunächst das „(Minimum-)Edge-Cover-Problem“ lösen und dann alle eventuell vorhandenen isolierten Knoten mit einelementigen Mengen überdecken. Das „(Minimum-)Edge-Cover-Problem“ ergibt sich durch die Einschränkung $\mathcal{S}' = \{S \in \mathcal{S} : |S| = 2\}$ und $V' = \bigcup_{S \in \mathcal{S}'} S$. Für dieses Problem gibt es einen Polynomialzeitalgorithmus mit Laufzeit $O(|V|^3)$. Man bestimmt zunächst ein Maximum-Matching mit Edmonds „Blossom Algorithmus“ und fügt danach noch Kanten ein, die je einen weiteren noch nicht überdeckten Knoten überdecken, bis alle Knoten überdeckt sind. Theoretische Betrachtungen zu Maximum-Matchings finden sich in Kapitel 10 von [29], Edmonds „Blossom Algorithmus“ wird in Abschnitt 10.5 beschrieben. Damit ergibt sich eine Minimum-Lösung. Das allgemeine „Set-Cover-Problem“ (Entscheidungsversion) ist NP-vollständig [28] und somit schwer exakt lösbar. Es gibt jedoch approximative heuristische Algorithmen, die mit geringerem Aufwand trotzdem annehmbare Lösungen liefern. Zwei davon sind unter anderem in Kapitel 16 von [29] beschrieben. Hier verwenden wir einen solchen approximativen Algorithmus. Falls die Instanz $\tilde{I}_F[j, l]$ redundant bezüglich $\tilde{\gamma}$

ist, dann löschen wir F aus allen Mengen $\tilde{\gamma}(j', l')$ mit $(j', l') \in \tilde{I}_F[j, l]$. Zu beachten ist, dass nach der Löschung einer redundanten Instanz eine andere vorher redundante Instanz nun nicht mehr redundant zu sein braucht. Damit hat die Reihenfolge der Löschung Einfluss auf das Endergebnis. Da wir keine vernünftige Zielfunktion für den Lösungsprozess kennen, wenden wir wieder eine Greedy-Heuristik an. Dazu durchlaufen wir wieder alle Knoten aus V und löschen zunächst redundante Instanzen kleiner Größe. Solche kleinen Instanzen sind wahrscheinlicher zufällig entstanden und somit weniger wahrscheinlich durch ein Neuron erzeugt als die größeren Instanzen. Eine genaue Beschreibung findet sich in Algorithmus 8.

Algorithmus 8 Löschung redundanter Instanzen

Input: $\tilde{\gamma} : V \rightarrow 2^{\tilde{\mathcal{F}}}$.

Ordne die Elemente von $\tilde{\mathcal{F}}$ aufsteigend nach der Größe ihres Definitionsbereichs.

for all $F \in \tilde{\mathcal{F}}$ **do**

for all $l \in A_F$ **do**

if $\tilde{I}_F[m(F), l]$ ist redundant **then**

$A_F := A_F \setminus \{l\}$.

for all $(j', l') \in \tilde{I}_F[m(F), l]$ **do**

$\tilde{\gamma}(j', l') := \tilde{\gamma}(j', l') \setminus \{F\}$.

end for

end if

end for

end for

Die Löschung redundanter Instanzen kann zur Folge haben, dass manche Charakteristikkandidaten nicht mehr mindestens ν Instanzen besitzen, die durch $\tilde{\gamma}$ aufgelistet sind. In solch einem Fall löschen wir den Charakteristikkandidaten komplett. Das ist in Algorithmus 9 beschrieben.

Zusammenfassend führen wir die folgenden Algorithmen aus, um eine geschätzte Lösung für unser Rekonstruktionsproblem zu erhalten: Bestimmung des geschätzten Verzögerungsgraphen mittels Algorithmus 1, dann Anwendung von Algorithmus 6 inklusive Algorithmus 5, Algorithmus 7, Algorithmus 8 und Algorithmus 9. Es kann vorkommen, dass es am Ende einige Knoten (j, l) mit $\tilde{\gamma}(j, l) = \emptyset$ gibt. Solch einen Knoten (j, l) interpretieren wir als aufgezeichnete Spitze eines Neurons, welches nur elektrischen Kontakt zur Elektrode e_j besitzt. Das ist möglich, da wir in unserer heuristischen Betrachtung Abweichungen von Annahme 2.3.3 erlaubt haben. Anders gesagt führen wir schließlich zugehörige normierte Charakteristiken $C^{(j)}$ ein, die - aufgefasst als Menge von Paaren - nur das Element $(j, 0)$ beinhalten. Dann legen wir $\tilde{\gamma}(j, l) = \{C^{(j)}\}$ fest und fügen $C^{(j)}$ zu $\tilde{\mathcal{C}}$ hinzu. Wir erinnern daran, dass ein Knoten (j, l) *einfach* bezüglich γ genannt wird, wenn $|\gamma(j, l)| = 1$ ist, das heißt, wenn es

Algorithmus 9 Löschung selten vorkommender Charakteristikkandidaten

Input: $\tilde{\mathcal{F}}$, $\{A_F : F \in \tilde{\mathcal{F}}\}$ und $\tilde{\gamma} : V \rightarrow 2^{\tilde{\mathcal{F}}}$.

```

for all  $F \in \tilde{\mathcal{F}}$  do
  if  $|A_F| < \nu$  then
    for all  $l \in A_F$  do
      for all  $(j', l') \in \tilde{I}_F[m(F), l]$  do
         $\tilde{\gamma}(j', l') := \tilde{\gamma}(j, l) \setminus \{F\}$ .
      end for
    end for
     $\tilde{\mathcal{F}} := \tilde{\mathcal{F}} \setminus \{F\}$ .
  end if
end for
 $\tilde{\mathcal{C}} := \tilde{\mathcal{F}}$ .

```

Output: Geschätzte Charakteristikenmenge $\tilde{\mathcal{C}}$ und geschätzte charakteristische Zuordnung $\tilde{\gamma}$.

nur einen Spike $\langle i, k \rangle$ gibt, der die zum Knoten (j, l) gehörende Spitze $\pi_{j,l}$ erzeugt. Nach Definition ist (j, l) adjazent zu allen anderen Knoten der Knotenmenge $I_{i,k}$ des k -ten Spikes von Neuron z_i . Falls dies die einzigen Nachbarn des einfachen Knotens (j, l) in \tilde{G} sind, so nennen wir ihn einen *normalen Knoten*. Demzufolge ist (j, l) normal, falls die zugehörige Spitze nur von einem Neuron z_i erzeugt wird und falls $|\tilde{N}[j, l]| = |N_i|$ ist. Es ist aus dem folgenden Grund nicht unwahrscheinlich, dass ein Knoten normal ist: Es ist eher unwahrscheinlich, dass die Spitzen von zwei Neuronen zu exakt derselben Zeit an derselben Elektrode aufgezeichnet werden und es ist auch unwahrscheinlich, dass die Differenz $\pi_{j',l'} - \pi_{j,l}$ mindestens ν -mal auftaucht, falls (j', l') – im Gegensatz zu (j, l) – keine Spitze von z_i repräsentiert.

Satz 2.4.1. *Falls für jedes Neuron z_i mindestens $\frac{\nu}{2}|N_i|$ der von z_i erzeugten Knoten normal sind und falls jede Instanz eines Spikes mindestens einen normalen Knoten enthält, so lösen die Heuristiken das Rekonstruktionsproblem 2.3.1 exakt, falls die Annahmen 2.3.1, 2.3.2, 2.3.3 zutreffen.*

Beweis. Sei $i \in [m]$. Wegen der ersten Bedingung des Satzes und der Annahme 2.3.1, existiert eine Elektrode e_j in der Nachbarschaft von z_i , sodass mindestens $\nu/2$ Knoten von aufgezeichneten Spitzen von z_i an Elektrode e_j normal sind. Falls (j, l) solch ein normaler Knoten ist, dann ist der Nachbarschaftsgraph $\tilde{G}[j, l]$, dessen Knotenmenge $I_{i,k}$ für ein gewisses k ist, ein vollständiger Graph und somit findet der Greedy-Algorithmus diese Clique $K = I_{i,k}$. Die Charakteristik F_K ist nach Definition genau die Charakteristik von z_i und sie wird zu \mathcal{M} in Algorithmus 6 hinzugefügt. Außerdem wird sie zu $\tilde{\mathcal{F}}$ hinzugefügt, da sie $\nu/2$ -mal zur Multimenge \mathcal{M} hinzuge-

fügt wird. Nach Annahme 2.3.1 wird sie am Ende von Algorithmus 6 nicht gelöscht. Damit wird die Charakteristik C_i von z_i als Charakteristikkandidat gefunden. Nach der zweiten Bedingung des Theorems ist keine Instanz einer Charakteristik eines Neurons redundant. Demzufolge wird keine Instanz einer Charakteristik eines Neurons bei der Anwendung von Algorithmus 8 gelöscht. Allerdings werden alle anderen Instanzen, die keine Instanzen von Charakteristiken eines Neurons sind, von diesem Algorithmus gelöscht. Das liegt daran, dass sie alle redundant sind, da die Knoten dieser Instanzen alle auch zu Instanzen von Charakteristiken von Neuronen gehören. Da diese Instanzen alle gelöscht werden, werden schließlich auch die zugehörigen falschen Charakteristikkandidaten durch Algorithmus 9 entfernt. \square

Der gewählte Anteil $1/2$ von normalen Knoten bezieht sich hier auf den Faktor in Algorithmus 6 zur Bestimmung der Charakteristikkandidaten. Natürlich bleibt Satz 2.4.1 gültig, falls zum Beispiel nur $\frac{\nu}{3}|N_i|$ der Knoten, die zu den von einem beliebigen Neuron z_i erzeugten Spitzen gehören, normal sind, wenn gleichzeitig auch in Algorithmus 6 $\nu/2$ durch $\nu/3$ ersetzt wird. Wenn die zweite Bedingung des Satzes wirklich erfüllt ist (was allerdings nicht überprüft werden kann), dann kann der ganze Algorithmus mithilfe der nächsten Proposition vereinfacht werden:

Proposition 2.4.1. *Wenn jede Knotenmenge eines Spikes mindestens einen normalen Knoten enthält, dann ist für jeden Knoten $(j, l) \in V$ die Knotenmenge des Nachbarschaftsgraphen $\tilde{G}[j, l]$ genau dann eine Instanz eines Neurons, wenn $\tilde{G}[j, l]$ ein vollständiger Teilgraph ist.*

Beweis. Falls $I_{i,k} = \tilde{N}[j, l]$ gilt, dann ist $\tilde{G}[j, l]$ ein vollständiger Graph nach Proposition 2.2.2. Sei also umgekehrt $\tilde{G}[j, l]$ ein vollständiger Graph. Sei $\langle i, k \rangle$ eine Ursache von (j, l) . Dann gilt $I_{i,k} \subseteq \tilde{N}[j, l]$. Wir müssen zeigen, dass $\tilde{N}[j, l] \subseteq I_{i,k}$ ist. Deswegen sei $(j', l') \in \tilde{N}[j, l]$. Sei außerdem $(j^*, l^*) \in I_{i,k}$ ein normaler Knoten, der nach Voraussetzung des Satzes existiert. Dann muss $\langle i, k \rangle$ auch eine Ursache von (j^*, l^*) sein und es ist $I_{i,k} = \tilde{N}[j^*, l^*]$. Da (j, l) adjazent zu (j', l') und zu (j^*, l^*) ist und da $\tilde{G}[j, l]$ vollständiger Graph ist, ist (j', l') somit auch adjazent zu (j^*, l^*) . Demzufolge gilt $(j', l') \in \tilde{N}[j^*, l^*]$, also $(j', l') \in I_{i,k}$. \square

Aus Proposition 2.4.1 folgt, dass es ausreicht, für jeden Knoten (j, l) zu testen, ob der Nachbarschaftsgraph $\tilde{G}[j, l]$ ein vollständiger Graph ist. Wenn das der Fall ist, so kann die zugehörige normierte Charakteristik zur Menge der geschätzten normierten Charakteristiken hinzugefügt werden und diese Charakteristik kann auch gleich jedem Knoten aus $\tilde{G}[j, l]$ zugeordnet werden. Dies ergibt dann bereits die exakte Lösung des Rekonstruktionsproblems.

Wie schon in Abschnitt 2.2.3 testen wir den Algorithmus anhand von simulierten Daten, diesmal aber mit weniger Aufwand und weniger realistischen Daten, die aber zu den gemachten Annahmen des Kapitels trotzdem passen. Das Feuerverhalten der Neuronen ist wieder als ein Erneuerungsprozess modelliert, bei dem die

Länge zwischen zwei aufeinanderfolgenden Spikes die Summe einer Konstanten, die die Refraktärzeit repräsentiert, und der Realisierung einer exponentialverteilten Zufallsvariablen. In diesen Tests haben wir die Refraktärzeit auf 100 Zeiteinheiten festgelegt, wobei wir annehmen, dass diese 100 Zeiteinheiten einer Millisekunde entsprechen. Wenn beispielsweise $\lambda = 1/900$ ist, dann ist die durchschnittliche Länge des Intervalls zwischen zwei Spikes gleich $100 + 900 = 1000$ Zeiteinheiten, sodass in einer Sekunde ungefähr 100 Spikes bei dieser Parameterkonfiguration entstehen. Wir nehmen hier an, dass die Neuronen unabhängig voneinander feuern. Die Parameter λ der Exponentialverteilungen werden für jedes Neuron gleichverteilt aus dem Intervall $[\lambda^*/2, 3\lambda^*/2]$ ausgewählt, sodass λ^* dem Erwartungswert der Parameter entspricht. Damit werden für das Intervall $[0, 100\,000]$ die Spikezeitpunkte erzeugt und dann auf ganzzahlige Werte gerundet. Das führt zu einer genügend großen Anzahl nicht normaler Knoten im geschätzten Verzögerungsgraphen, ansonsten wäre die Rekonstruktion zu einfach und die Ergebnisse wenig aussagekräftig. Die elektrischen Kontakte von Neuronen zu den Elektroden werden zufällig erstellt, wobei ein Neuron wenigstens 1 und höchstens 10 Elektrodenachbarn besitzt. In jedem Fall haben wir $n = 60$ Elektroden verwendet. Die Verzögerungen werden gleichverteilt aus der Menge $\{0\} \cup [L]$ gewählt, sodass die durchschnittliche Verzögerung $L/2$ beträgt. Der Parameter ν aus Annahme 2.3.1 wird auf die kleinste Anzahl an Spikes gesetzt, die von einem der simulierten Neuronen erzeugt wird und der Parameter δ von Annahme 2.3.2 wird auf den größten Absolutwert der relativen Verzögerungen gesetzt. Wir haben für vier verschiedene Parameterkonfigurationen, beschrieben in Tabelle 2.4.1, mit jeweils 100 Durchläufen Daten erzeugt und für jeden Durchlauf die geschätzte Menge der normierten Charakteristiken $\tilde{\mathcal{C}}$ und die geschätzte charakteristische Zuordnung $\tilde{\gamma}$ bestimmt.

Testserie	1	2	3	4
Anzahl der Neuronen	50	100	50	100
Durchschnittliche Verzögerung ($L/2$)	25	25	50	50
Durchschnittliches λ	0.001	0.0003	0.001	0.0003

Tab. 2.4.1: Parameterkonfigurationen von vier Serien simulierter Daten. Für jede Konfiguration wurden 100 unterschiedliche Datensätze erzeugt. Die Anzahl der Elektroden war dabei in jedem Durchlauf 60 und die Refraktärzeit 100.

Anhand der originalen Menge von normierten Charakteristiken \mathcal{C} und der originalen charakteristischen Zuordnung γ , bestimmen wir den relativen Fehler der normierten Charakteristiken ζ , siehe (2.12), und den relativen Rekonstruktionsfehler Γ , siehe (2.13). Die Ergebnisse sind in Tabelle 2.4.2 zusammengefasst.

Je mehr Spitzen im Zeitintervall $[0, 100\,000]$ generiert werden, desto geringer ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Knoten normal ist, und desto höher ist die Wahr-

Testserie	1	2	3	4
Durchschnittliche Gesamtanzahl von aufgezeichneten Spitzen	24811.67	16076.93	24717.7	15886.62
Durchschnittliche Anzahl geschätzter normierter Charakteristiken	49.79	99.43	49.81	99.25
Relativer Fehler der normierten Charakteristiken ζ	0	0.0033	0	0.0022
Relativer Rekonstruktionsfehler Γ	0.000097	0.000159	0.000107	0.000158

Tab. 2.4.2: Ergebnisse des Rekonstruktionsalgorithmus für die simulierten Daten

scheinlichkeit, dass die Greedy-Clique nicht die Knotenmenge eines Spikes repräsentiert. In solch einer Situation ist es wahrscheinlicher, dass normierte Charakteristiken der Neuronen vom Algorithmus nicht gefunden werden, da sie möglicherweise weniger als $\nu/2$ -mal erkannt werden.

Wenn die Anzahl der Neuronen 100, die durchschnittliche Verzögerung 25 und das durchschnittliche λ gleich 0.001 ist, dann beträgt die Laufzeit des Rekonstruktionsalgorithmus für einen generierten Datensatz mit 43 174 aufgezeichneten Spitzen 57 Sekunden, wobei ein Intel Core i7-2600 3.4GHz Vierkern-Prozessor (von dem wohl nur ein Kern benutzt wurde) und 16GB RAM zum Einsatz kamen.

Das Zeitintervall der Länge 100 000 entspricht in diesem Fall einer Sekunde. Das scheint wenig zu sein, ist aber bei den gegebenen Bedingungen ausreichend, um mit nur einem kleinen Fehler die normierten Charakteristiken zu schätzen. Für größere Zeitintervalle kann die Rekonstruktion deutlich schneller und effizienter durchgeführt werden, da die Menge der geschätzten normierten Charakteristiken \tilde{C} schon bekannt ist: Gegeben seien eine neue Spitze $\pi_{j,l}$ und alle weiteren Spitzen in einem Zeitintervall der Länge δ um den Zeitpunkt $\pi_{j,l}$. Dann braucht man nur zu testen, welche der Elemente von \tilde{C} für (j, l) zulässig sind. Bei einem positiven Testergebnis wird die normierte Charakteristik dem Knoten (j, l) zugeordnet. Das ist dann der Anfang eines Online-Spike-Sorting-Verfahrens.

2.5 Schätzung des Verbindungsgraphen mittels Cliquesüberdeckungen

Wir betrachten nun noch einmal den auf Seite 10 eingeführten bipartiten Verbindungsgraphen G_C . Daraus erhalten wir den Zell-Hypergraphen $H_Z = (V_Z, F_Z)$, wobei

$V_Z = [n]$ die Menge der Indizes der Elektroden und $F_Z = \{N_i : i \in [m]\}$ die Menge der Nachbarschaften ist. Gesucht ist nun eine gute Schätzung für H_Z , woraus sich eine Schätzung für den Verbindungsgraphen konstruieren lässt. Wir nennen eine Zelle z_i genau dann *maximal verbunden*, wenn es keine Zelle z_k gibt, mit $N_i \subsetneq N_k$. Zellen z_i und z_k mit gleicher Nachbarschaft können anhand der oft nur sehr kleinen Verzögerungen unter realen Bedingungen mit Messfehlern nur schwer unterschieden werden. Hier muss man dann mit einem klassischen Spike-Sorting-Verfahren fortsetzen, das auf dem Vergleich der Wellenformen beruht. Je mehr Elemente N_i und damit auch N_k haben, desto leichter wird die Unterscheidung, da man gleichzeitig $|N_i|$ Aufzeichnungen zur Verfügung hat. Wir fassen daher Zellen mit gleicher Nachbarschaft zu einer idealisierten Zelle zusammen. Ein mögliches Vorgehen zur Bestimmung der Nachbarschaften ist wie folgt:

1. Bestimme aus dem Verzögerungsgraphen einige maximal verbundene Zellen. Falls keine gefunden wurden, breche hier ab. Ansonsten fahre mit 2. fort.
2. Entferne aus dem Verzögerungsgraphen die Instanzen dieser (geschätzten) Zellen und fahre mit 1. fort.

Wir wollen hier den ersten Schritt näher beleuchten. Dazu führen wir weitere Begriffe ein. Sei $H = (V, F)$ ein Hypergraph. Wir betrachten den *2-section Graph* (Cliquengraph) von H , das heißt den Graph $G_H = (V, E_H)$ auf der Knotenmenge von H , wobei $\{u, v\} \in E_H$, wenn es eine Kante in H gibt, die sowohl u als auch v enthält. Eine Teilmenge C von V nennen wir *schwache Clique* von H , falls C eine Clique in G_H ist. Eine *schwache Kantencliquenüberdeckung* von H ist eine Familie \mathfrak{C} von schwachen Cliques von H , sodass für alle Hyperkanten $e \in F$ ein $C \in \mathfrak{C}$ existiert mit $e \subseteq C$. Im 1. Schritt bestimmen wir nun zunächst den *geschätzten 2-section Graphen* $G_{H_Z} = (V_{H_Z}, E_{H_Z})$ vom Zell-Hypergraphen H_Z wie folgt: Es ist $V_{H_Z} = V_Z$. Wir haben $ij \in E_{H_Z}$ genau dann, wenn $|E_{i,j}| \geq \nu$, es also im Verzögerungsgraphen zwischen den zu den Elektroden zugehörigen Knotenmengen V_i und V_j mindestens ν Kanten gibt. Weiterhin bestimmen wir für „kleine“ Teilmengen A von V_Z die Anzahl $s(A)$ derjenigen vollständigen Teilgraphen des Verzögerungsgraphen auf $|A|$ Knoten, wobei für jedes $i \in A$ genau ein Knoten aus V_i enthalten ist. Da der Verzögerungsgraph n -partit ist, ist die letzte Bedingung automatisch erfüllt. Insbesondere gilt also $s(\{i, j\}) \geq \nu$, falls $ij \in E$ ist. Da induzierte Teilgraphen von vollständigen Graphen selbst wieder vollständig sind, gilt außerdem

$$s(B) \geq s(A), \text{ falls } B \subseteq A. \quad (2.15)$$

Es kann nun passieren, dass an einigen Elektroden Spikes nicht aufgezeichnet werden, beispielsweise durch Überlappungen oder übermäßiges Rauschen. Diesen Fall lassen wir ausdrücklich zu. Daher kann es passieren, dass für eine Zelle z_i und

$B \subseteq A = N_i$ auch $s(B) > s(A)$ ist. Ein einfaches Beispiel mit 3 Elektroden und einer Zelle z_i mit $N_i = \{1, 2, 3\}$ mit Verzögerungen, die konstant 0 sind, soll verdeutlichen, dass dieser Unterschied groß werden kann, siehe Abbildung 2.5.1.

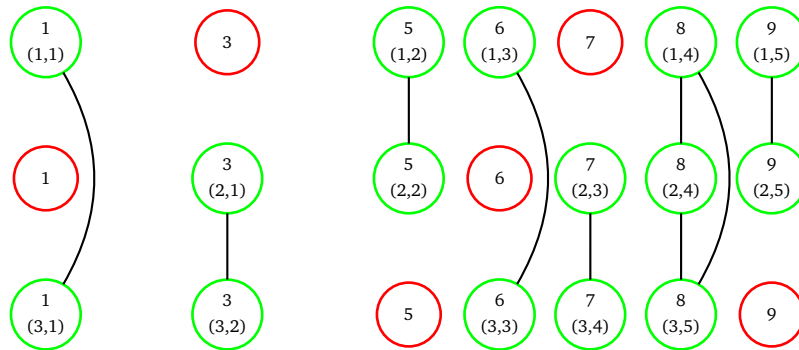


Abb. 2.5.1: Hier sind die unvollständigen Aufzeichnungen einer Zelle mit Nachbarschaft $N = \{1, 2, 3\}$ im Verzögerungsgraphen dargestellt. Dies soll veranschaulichen, was bei nicht-aufgezeichneten Spikes passieren kann. Die grünen Kreise enthalten die Aufzeichnungszeitpunkte der Spikes und den entsprechenden Knotennamen im Verzögerungsgraph. In den roten Kreisen sind die Zeitpunkte der Spikes enthalten, die fehlerhafterweise nicht aufgezeichnet wurden und somit auch keinen Knoten des Verzögerungsgraphen repräsentieren. Es gilt somit hier $s(\{1, 2\}) = s(\{1, 3\}) = s(\{2, 3\}) = 3$, jedoch $s(\{1, 2, 3\}) = 1$.

Aus dem geschätzten 2-section Graphen G_{H_Z} bilden wir nun den *gesicherten Zell-Hypergraphen* $H_S = (V_S, F_S)$ mit $V_S = V_Z$. Wir setzen $A \in F_S$, falls $s(A) \geq \nu$ ist. Wegen (2.15) gilt

$$B \subseteq A \in F_S \Rightarrow B \in F_S.$$

Würden keine Fehler auftreten und wäre $s(A) < \nu$ für alle A , die nicht vollständig in der Nachbarschaft einer Zelle enthalten sind (zufälliges häufiges Auftreten von Spikeaufzeichnungen mit gleicher relativer Verzögerung ist unwahrscheinlich), so wäre die Menge

$$\mathfrak{C} = \{N_i : z_i \text{ ist maximal verbundene Zelle}\}$$

eine schwache Cliquesüberdeckung von H_S . Da wir aber Fehler haben, suchen wir nach einer möglichst guten schwachen Cliquesüberdeckung von H_S mit möglichst großen und sicheren Cliques. Hierzu legen wir einen unteren Schwellwert $\nu_0 < \nu$ fest, sodass $A \subseteq V_S$ nur dann potentiell als Nachbarschaft einer Zelle in Frage kommt, wenn $s(A) > \nu_0$ ist. Für jedes $A \subseteq V_Z$, das eine Clique im geschätzten 2-section Graphen G_{H_Z} ist, legen wir nun ein Gewicht wie folgt fest:

$$w(A) = \begin{cases} 1, & \text{falls } s(A) \geq \nu, \\ \frac{\nu - \nu_0}{s(A) - \nu_0}, & \text{falls } \nu_0 < s(A) < \nu, \\ \infty, & \text{falls } s(A) \leq \nu_0. \end{cases}$$

Für eine Cliquesüberdeckung \mathfrak{C} sei

$$w(\mathfrak{C}) = \sum_{C \in \mathfrak{C}} w(C).$$

Wir suchen nun eine schwache Kantencliquesüberdeckung \mathfrak{C} mit minimalem Gewicht $w(\mathfrak{C})$ und betrachten die Elemente C von \mathfrak{C} als Nachbarschaften von maximal verbundenen Zellen. Hierdurch werden die gesicherten (Teil-)Nachbarschaften $A \in F_S$ überdeckt und größere Cliques C bevorzugt, falls $s(C)$ nicht zu weit von ν entfernt ist. Es werden also relativ sichere große Nachbarschaften geschätzt. Zusammenfassend betrachten wir also das folgende Problem:

Problem 2.5.1. Sei $H = (V, F)$ ein Hypergraph und keine schwache Clique $C \subseteq V$ sei größer als k_{max} . Außerdem sei eine Abbildung w gegeben, die jeder schwachen Clique C von H einen Wert aus $\mathbb{R}_+ \cup \{\infty\}$ zuordnet. Finde eine schwache Kantencliquesüberdeckung \mathfrak{C} von H mit minimalem $w(\mathfrak{C})$.

Dieses Problem können wir in ein Knotencliquesüberdeckungsproblem transformieren, um es algorithmisch einfacher handhaben zu können. Dazu betrachten wir zunächst die folgende Transformation, die im NP-Vollständigkeitsbeweis des Kantencliquesüberdeckungsproblems verwendet wurde, um es auf das Knotencliquesüberdeckungsproblem zu reduzieren, siehe [30]. Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit $V = [n]$. Dann wird der transformierte Graph $\tilde{G} = (\tilde{V}, \tilde{E})$ durch $\tilde{V} = E$ und

$$\{\{i, j\}, \{i', j'\}\} \in \tilde{E}, \text{ falls eine Clique } C \subseteq V \text{ mit } i, j, i', j' \in C \text{ existiert.}$$

definiert. Sei $\bar{\chi}_v(G)$ (beziehungsweise $\bar{\chi}_e(G)$) die *Knotencliquesüberdeckungszahl* (beziehungsweise *Kantencliquesüberdeckungszahl*) des Graphen $G = (V, E)$, also die minimale Anzahl von Cliques, deren induzierte Teilgraphen alle Knoten (beziehungsweise Kanten) von G überdecken. Es kann gezeigt werden, dass $\bar{\chi}_e(G) = \bar{\chi}_v(\tilde{G})$, welches einen wesentlichen Teil des NP-Vollständigkeitsbeweises des Kantencliquesüberdeckungsproblems darstellt, da die Transformation in Polynomialzeit durchgeführt werden kann. Dazu muss nur für alle Paare von Kanten getestet werden, ob die bis zu vier verschiedenen Endknoten, alle untereinander benachbart sind. Diese Konzepte wollen wir nun verallgemeinern und auf das Problem 2.5.1 anwenden. Dafür definieren wir den *schwachen Kantencliquengraphen* $\tilde{G}_H = (\tilde{V}, \tilde{E})$ eines Hypergraphen $H = (V, F)$ wie folgt: Es seien $\tilde{V} = F$ und für $A, B \in \tilde{V}$, $A \neq B$, sei

$$AB \in \tilde{E} \iff \exists \text{ Clique } C \text{ in } G_H \text{ mit } A, B \subseteq C.$$

Weiterhin definieren wir das Gewicht $\tilde{w}(\tilde{C})$ einer Clique \tilde{C} in \tilde{G}_H folgendermaßen: Für $\tilde{C} = \{A_1, A_2, \dots, A_k\}$ sei $\tilde{w}(\tilde{C}) := w(A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_k)$. Damit können wir das zugehörige Knotenüberdeckungsproblem erstmal allgemein formulieren.

Problem 2.5.2. Sei $G = (V, E)$ ein Graph und w eine Abbildung, die jeder Clique $C \subseteq V$ einen Wert aus $\mathbb{R}_+ \cup \{\infty\}$ zuordnet. Finde eine Knotencliquenüberdeckung \mathfrak{C} von G mit minimalem $w(\mathfrak{C})$.

In unserem speziellen Fall suchen wir also eine Knotencliquenüberdeckung von \tilde{G}_{H_S} mit minimalem Gewicht bezüglich der Funktion \tilde{w} . Nun zeigen wir, dass wir aus einer optimalen Lösung von Problem 2.5.2 für \tilde{G}_{H_S} einfach eine optimale Lösung von Problem 2.5.1 für H_S generieren können. Dazu benötigen wir ein paar zusätzliche Begriffe, die wir nun einführen wollen. Sei $H = (V, F)$ ein Hypergraph mit Gewichtsfunktion w wie in Problem 2.5.1 gegeben. Die *schwache gewichtete Kantencliquenüberdeckungszahl* von H sei das kleinste Gewicht $\bar{\chi}_e^w(H)$ einer schwachen Kantencliquenüberdeckung von H bezüglich w . Weiterhin sei ein Graph $G = (V, E)$ mit Gewichtsfunktion w wie in Problem 2.5.2 gegeben. Dann definieren wir die *gewichtete Knotencliquenüberdeckungszahl* von G als das kleinste Gewicht $\bar{\chi}_v^w(G)$ einer Knotencliquenüberdeckung von G bezüglich w . Mit diesen Definitionen sind wir in der Lage den folgenden Satz zu zeigen. Dabei sei der schwache Kantencliquengraph \tilde{G}_H samt Gewichtsfunktion \tilde{w} wie auf Seite 46 definiert.

Proposition 2.5.1. Sei $H = (V, F)$ ein Hypergraph mit Gewichtsfunktion w wie in Problem 2.5.1 gegeben. Dann gilt

$$\bar{\chi}_e^w(H) = \bar{\chi}_v^{\tilde{w}}(\tilde{G}_H).$$

Beweis. Sei \mathfrak{C} eine schwache Kantencliquenüberdeckung von H vom Gewicht $\bar{\chi}_e^w(H)$. Für jedes $C \in \mathfrak{C}$ sei $\tilde{C} = \{A \in F : A \subseteq C\}$. Dann ist \tilde{C} eine Clique in \tilde{G}_H mit $\tilde{w}(\tilde{C}) = w(C)$ und $\tilde{\mathfrak{C}} = \{\tilde{C} : C \in \mathfrak{C}\}$ ist eine Knotencliquenüberdeckung von \tilde{G}_H vom Gewicht $\bar{\chi}_e^w(H)$. Demzufolge gilt $\bar{\chi}_e^w(H) \geq \bar{\chi}_v^{\tilde{w}}(\tilde{G}_H)$. Nun sei $\tilde{\mathfrak{C}}$ eine Knotencliquenüberdeckung von \tilde{G}_H vom Gewicht $\bar{\chi}_v^{\tilde{w}}(\tilde{G}_H)$. Für jedes $\tilde{C} \in \tilde{\mathfrak{C}}$ sei $C = \bigcup_{A \in \tilde{C}} A$. Dann ist C eine schwache Clique in H vom Gewicht $w(C) = \tilde{w}(\tilde{C})$. Um dies zu zeigen, betrachten wir zwei beliebige Knoten $x, y \in C$ und zeigen, dass sie in G_H benachbart sind. Zunächst betrachten wir den Fall, dass es ein $A \in \tilde{C}$ mit $x, y \in A$ gibt. Dann gilt nach Konstruktion von G_H , $\{x, y\} \in E_H$. Alternativ gibt es $A, A' \in \tilde{C}$ mit $x \in A$ und $y \in A'$. Da A und A' in \tilde{G}_H benachbart sind, existiert eine schwache Clique in H , deren induzierter Teilhypergraph beide Hyperkanten enthält, was impliziert, dass x und y benachbart sind. Somit ist dann auch $\mathfrak{C} = \{C : \tilde{C} \in \tilde{\mathfrak{C}}\}$ eine schwache Kantencliquenüberdeckung von H vom Gewicht $\bar{\chi}_v^{\tilde{w}}(\tilde{G}_H)$. Demzufolge gilt $\bar{\chi}_v^{\tilde{w}}(\tilde{G}_H) \geq \bar{\chi}_e^w(H)$. \square

Es stellt sich die Frage, warum wir hier den Umweg über den 2-section Graphen gehen und dabei nur schwache Cliquen von H betrachten. Man könnte zum Beispiel einen k -uniformen Hypergraphen $H = (V, F)$, das heißt einen Hypergraphen, dessen Kanten alle die Mächtigkeit k besitzen, direkt transformieren in $\tilde{H} = (\tilde{V}, \tilde{E})$ mit

$\tilde{V} = F$ und

$$\{A, A'\} \in \tilde{E}, \text{ falls eine Clique } C \subseteq V \text{ existiert, mit } A \cup A' \subseteq C.$$

Dabei sei C genau dann eine Clique in H , wenn $\binom{C}{k} \subseteq F$ ist. Das Problem dabei ist, dass dann zu einer Clique \tilde{C} in \tilde{H} die Menge mit $C = \bigcup_{e \in \tilde{C}} e$ nicht mehr zwangsläufig eine Clique C in H ist, was wichtig für den Beweis von Satz 2.5.1 war. Dies wird durch das folgende Beispiel verdeutlicht.

Beispiel 2.5.1. Wir betrachten den 3-uniformen Hypergraphen $H = (V, F)$ mit $V = [0, 5]$ und $F = \left(\binom{\{0,1,2,3,4\}}{3}\right) \cup \left(\binom{\{0,1,2,3,5\}}{3}\right) \cup \left(\binom{\{0,1,2,4,5\}}{3}\right)$. Es sind $\{0, 1, 3\}$ und $\{1, 2, 4\}$ in \tilde{H} benachbart, da $\{0, 1, 2, 3, 4\}$ eine Clique in H ist. Analog sieht man, dass auch $\{0, 1, 3\}$ und $\{0, 2, 5\}$ sowie $\{1, 2, 4\}$ und $\{0, 2, 5\}$ in \tilde{H} benachbart sind. Also ist $\{\{0, 1, 3\}, \{1, 2, 4\}, \{0, 2, 5\}\}$ eine Clique in \tilde{H} . Allerdings ist $\{0, 1, 2, 3, 4, 5\} = \{0, 1, 3\} \cup \{0, 2, 5\} \cup \{1, 2, 4\}$ keine Clique in H , denn $\{3, 4, 5\} \notin F$.

Betrachten wir nun wieder unser ursprüngliches Problem, für den gesicherten Zell-Hypergraphen H_S eine schwache Kantencliquesüberdeckung minimalen Gewichts zu finden. Ohne zusätzliche Annahmen ist dieses Problem, wie auch das normale Kantencliquesüberdeckungsproblem, NP-vollständig und somit schwer algorithmisch zu lösen. Dies trifft auch auf das gewichtete Knotencliquesüberdeckungsproblem zu. Hier kommt jetzt die Situation der Anwendung ins Spiel. Wir haben schon in Abschnitt 2.1 angenommen, dass die Nachbarschaften lokal begrenzt sind. Mit anderen Worten liegen die Elektroden, die zu der Nachbarschaft einer Zelle gehören, auf dem Multielektrodenarray relativ dicht beieinander. Damit ist insbesondere auch die Hyperkantenanzahl des gesicherten Zell-Hypergraphen H_S relativ klein. Wenn man nun die Elektroden geschickt nummeriert, sodass die Elektroden in derselben Nachbarschaft ähnliche Nummern aufweisen und dies für alle Nachbarschaften gilt, so gilt für H_S , dass die Differenz aus dem maximalen und dem minimalen Element einer Hyperkante für alle Hyperkanten relativ klein ist. Formal möchte man also eine Nummerierung der Knoten von H_S finden, sodass $\max\{\max(A) - \min(A) : A \in F_S\}$, die sogenannte Bandbreite, minimal wird. Dieses Bandbreitenproblem, welches in Kapitel 3 ausführlicher besprochen wird, ist leider auch NP-vollständig, siehe [37], aber es existieren Heuristiken, wie der Cuthill-McKee-Algorithmus [14], mit denen man zumindest eine gute Lösung finden kann. Der Vorteil einer solchen guten Nummerierung ist, dass die Bandbreite des Graphen durch eine Zahl b nach oben beschränkt werden kann und die Cliquesüberdeckungsprobleme für Graphen mit beschränkter Bandbreite in linearer Zeit lösbar sind. Siehe dazu [6] für einen Linearzeitalgorithmus, der auf dynamischer Programmierung beruht und sogar mit der schwächeren Voraussetzung der beschränkten Baumweite auskommt, auf die wir hier aber nicht näher eingehen wollen. Wegen der lokalen Begrenztheit und der relativ geringen Hyperkantenanzahl, können wir

annehmen, dass die obere Schranke b für die Bandbreite von H_S relativ klein sein wird. Nun wollen wir aber das Knotencliquenüberdeckungsproblem für den schwachen Kantencliquengraphen \tilde{G}_{H_S} effizient lösen. Allerdings ist es nicht klar, dass, wenn H_S eine beschränkte Bandbreite hat, auch \tilde{G}_{H_S} eine beschränkte Bandbreite besitzt. Um dieses Problem anzugehen benötigen wir noch ein paar zusätzliche Bezeichnungen. Für ganze Zahlen $i < j$ sei $[i, j] = \{i, i+1, \dots, j\}$. Für $A \subseteq [i, j]$ seien zudem $\underline{A} = \min(A)$ und $\overline{A} = \max(A)$. Weiter sei für natürliche Zahlen k die Menge $\binom{[i, j]}{k} = \{X \subseteq [i, j] : |X| = k\}$ definiert. Sei K nun die Menge aller Mächtigkeiten von Hyperkanten von H_S und b eine obere Schranke für die Bandbreite von H_S . Außerdem seien die Knoten von H_S von 0 bis n so nummeriert, dass für alle Hyperkanten $A \in F_S$ gilt, dass $\overline{A} - \underline{A} \leq b$ ist. Nun betrachten wir den Hypergraphen $H_B = (V_B, F_B)$ mit $V_B = V_S$ und

$$F_B = \left\{ X \in \bigcup_{k \in K} \binom{[0, n]}{k} : \overline{X} - \underline{X} \leq b \right\}.$$

Dann enthält H_B den gesicherten Zell-Hypergraphen H_S als Teilhypergraphen und H_B ist der Hypergraph der Bandbreite b , der alle möglichen Hyperkanten mit Mächtigkeit aus K enthält. Dabei gilt $\max(K) \leq b+1$, denn sonst kann der Hypergraph nicht die Bandbreite b besitzen. Nun betrachten wir den schwachen Kantencliquengraphen von H_B und bezeichnen ihn mit $G_{n, K, b} = (V_{n, K, b}, E_{n, K, b})$, da wir ihn später genauer untersuchen wollen. Damit gilt

$$V_{n, K, b} = \left\{ X \in \bigcup_{k \in K} \binom{[0, n]}{k} : \overline{X} - \underline{X} \leq b \right\}$$

und

$$E_{n, K, b} = \left\{ \{X, Y\} \subseteq V_{n, K, b} : \overline{X \cup Y} - \underline{X \cup Y} \leq b \right\}.$$

Da \tilde{G}_{H_S} ein Teilgraph von $G_{n, K, b}$ ist, ist die Bandbreite von $G_{n, K, b}$ eine obere Schranke für die Bandbreite von \tilde{G}_{H_S} . In Kapitel 3 werden wir die Bandbreite des Graphen für unterschiedliche Fälle genau untersuchen, wobei wir zunächst in den Abschnitten 3.2, 3.3 und 3.4 nur einelementige Mengen $K = \{k\}$ zulassen, was vorkommt, wenn H_S ein k -uniformer Hypergraph ist. Diese Resultate verallgemeinern wir dann schließlich auf beliebige K in Abschnitt 3.5. Wir greifen hier schon einmal vor, dass die Bandbreite von $G_{n, K, b}$ für konstantes b von n unabhängig nach oben beschränkt werden kann und ab einem hinreichend großen n sogar konstant ist, siehe dazu auch Satz 3.5.1. Damit ist auch die Bandbreite von \tilde{G}_{H_S} nach oben durch eine Konstante beschränkt. Dieses Resultat ermöglicht es, dass wir einen relativ einfachen, auf dynamischer Optimierung basierenden Algorithmus zur Bestimmung einer Knotencliquenüberdeckung mit minimalem Gewicht vom schwachen Kantencliquengraphen \tilde{G}_{H_S} angeben können.

Wir betrachten jetzt wieder allgemein einen Graphen $G = (V, E)$ mit $V = [n]$ und durch b nach oben beschränkter Bandbreite. Außerdem sei eine Gewichtsfunktion w

gegeben, die jeder Clique $C \subseteq V$ einen Wert aus $\mathbb{R}_+ \cup \{\infty\}$ zuordnet. Wir nennen $i \in V$ einen *Startknoten*, falls es einen Nachbarn $j \in V$ von i gibt mit $j > i$. Für $t = 1, \dots, n$ sei $G_t = G[[t]]$ der durch $[t]$ induzierte Teilgraph von G , wobei wir G_0 als den leeren Graphen definieren. Weiter sei \mathcal{F}_t die Familie der induzierten Teilgraphen von G_t , die durch Wegnahme einer gewissen Anzahl von Startknoten aus $\{t-b+1, \dots, t\} \cap [n]$ entstehen. Dabei gilt $|\mathcal{F}_t| \leq 2^b$ sowie $G \in \mathcal{F}_n$. Im Sinne der dynamischen Optimierung gehen wir davon aus, dass $\bar{\chi}_v^w(F')$ für alle $F' \in \mathcal{F}_{t-1}$ bekannt sei. Wir können nun $\bar{\chi}_v^w(F)$ für alle $F \in \mathcal{F}_t$ wie folgt bestimmen. Dazu bezeichne $V(F)$ die Knotenmenge von F .

1. Fall: $t \notin V(F)$.

Dann ist t ein Startknoten, der aus G_t mit eventuell weiteren Knoten entfernt wurde. Dann ist $F \in \mathcal{F}_{t-1}$ und somit $\bar{\chi}_v^w(F)$ bekannt.

2. Fall: $t \in V(F)$.

Sei \mathcal{C}_t die Familie aller Cliques in F , die t enthalten. Es gilt $|\mathcal{C}_t| \leq 2^b$, da t wegen der beschränkten Bandbreite höchstens b Nachbarn in F hat. Für $C \in \mathcal{C}_t$ sei $F - C$ der induzierte Teilgraph von F , der durch Wegnahme der Knoten aus C und aller mit ihnen inzidenten Kanten entsteht. Da alle Knoten aus $[t-1]$, die adjazent zu t sind, Startknoten sind und in $\{t-b+1, \dots, t-1\}$ liegen, ist $F - C \in \mathcal{F}_{t-1}$. Da t durch mindestens eine Clique überdeckt werden muss, folgt

$$\bar{\chi}_v^w(F) = \min\{\bar{\chi}_v^w(F - C) + w(C) : C \in \mathcal{C}_t\}.$$

Nach diesen Vorbereitungen können wir nun einen Algorithmus zur Bestimmung von $\bar{\chi}_v^w(G)$ angeben.

Algorithmus 10 Iterative Cliquesüberdeckung

Input: Graph $(V = [n], E)$ mit $|i - j| \leq b$ für alle $\{i, j\} \in E$.

Setze $\bar{\chi}_v^w(G_0) = 0$.

for $t := 1$ **to** n **do**

for all $F \in \mathcal{F}_t$ **do**

if $t \in V(F)$ **then**

$$\bar{\chi}_v^w(F) := \min\{\bar{\chi}_v^w(F - C) + w(C) : C \in \mathcal{C}_t\}$$

end if

end for

end for

Output: $\bar{\chi}_v^w(G)$.

Damit beschließen wir dieses Kapitel und bestimmen im nächsten Kapitel die Bandbreite von $G_{n,K,b}$ unter verschiedenen Annahmen an b .

Kapitel 3

Bandbreitenbestimmung des Graphen $G_{n,k,b}$

In diesem Kapitel wollen wir uns mit einer Eigenschaft von Graphen beschäftigen, deren ursprüngliche Motivation einerseits aus der Betrachtung von Codes und andererseits aus dem Wunsch nach effizientem Rechnen mit dünnbesetzten Matrizen herrührt. Die geschichtlichen Hintergründe wollen wir im nächsten Abschnitt beschreiben, doch zunächst werden wir klären, um was es sich bei der sogenannten *Bandbreite* handelt. Das Bandbreitenproblem für Graphen, aufgefasst als Optimierungsproblem, besteht darin, eine Nummerierung der Knoten derart zu finden, dass die maximale Differenz der Nummern zweier benachbarter Knoten minimal ist. Für eine formale Einführung benötigen wir jedoch noch ein paar Vorbereitungen. Wir erinnern, dass $[n] = \{1, \dots, n\}$. Weiter erinnern wir an die Erweiterung dieser Schreibweise in Form von $[i, j] = \{i, i+1, \dots, j-1, j\}$ für ganze Zahlen i, j mit $i < j$. Für einen einfachen Graphen $G = (V, E)$ mit $|V| = n$ nennen wir eine Bijektion $f : V \rightarrow [n]$ eine *Nummerierung* von G . Sei f nun eine Nummerierung von G . Wir nennen

$$B_f(G) := \max\{|f(u) - f(v)| : \{u, v\} \in E\}$$

die *Bandbreite* von f . Damit können wir die *Bandbreite* von G definieren als

$$B(G) := \min\{B_f(G) : f \text{ ist eine Nummerierung von } G\}.$$

Dabei nennen wir eine Nummerierung f *Bandbreitennummerierung* von G , wenn $B_f(G) = B(G)$. Weiter nennen wir $d_f(u, v) := |f(u) - f(v)|$ für zwei Knoten $u, v \in V$ die *f-Distanz* von u und v . Das Konzept der Bandbreite kann auch einfach auf Hypergraphen $H = (V, E)$ erweitert werden. Dort haben wir

$$B_f(H) := \max\{|f(u) - f(v)| : \exists e \in E \text{ mit } u, v \in e\}$$

und die Definition der Bandbreite des Hypergraphen ist identisch mit der für Graphen. Es gibt verschiedene verwandte Eigenschaften, wie die Bandbreitensumme

oder die zyklische Bandbreite, die aber nicht Gegenstand dieser Arbeit sind. Die erste Erwähnung des Bandbreitenproblems im graphentheoretischen Sinne findet sich in der Arbeit [22] von Harper, bei der Untersuchung eines Problems aus der Codierungstheorie. Dort wird das Bandbreitensummenproblem für den Hyperwürfel gelöst und am Ende noch die Frage aufgeworfen, wie denn die Knoten des Hyperwürfels nummeriert werden müssten, damit die Bandbreite minimal wird.

Die Bandbreitenminimierung hat einige Anwendungen. Die früheste ist die effiziente Speicherung und algorithmische Nutzung dünnbesetzter symmetrischer Matrizen, die beispielsweise bei der Diskretisierung partieller Differentialgleichungen auftreten, vergleiche hierzu [41]. Nach [8] war dies schon in den 1950er-Jahren relevant, wobei zum damaligen Zeitpunkt noch keine graphentheoretische Beschreibung des Problems vorlag, sondern die Bandbreite von Matrizen betrachtet wurde. Das Ziel ist dort, zu einer symmetrischen Matrix M eine simultane Permutation der Zeilen und Spalten derart zu finden, dass für die Einträge der permutierten Matrix M' folgendes gilt:

$$\max_{m'_{ij} \neq 0} |i - j| \text{ ist minimal.}$$

Einige andere Anwendungen, wie das Problem der optimalen Platzierung von Modulen auf einem Computerchip mit einer großen Anzahl von Transistoren (VLSI-Design), das binäre Bedingungserfüllungsproblem (constraint satisfaction problem) und die Minimierung der Effekte von externen Störungen auf Mehrkanal-Datenübertragung werden beispielsweise in [8, 4, 12] besprochen. Es wurde gezeigt, dass das Bandbreitenproblem NP-schwer ist [37] und es wurde auch gezeigt, dass selbst eine Approximation mit einem multiplikativen Faktor kleiner 2 NP-schwer [15] ist. Daher sind verschiedene Heuristiken, wie der Cuthill-McKee-Algorithmus [14] oder ähnliche Ansätze, vergleiche [20], bei Anwendern sehr beliebt. Jedoch ist für manche Graphen-Klassen die Bandbreite bekannt. Diese schließen folgende Graphen ein: der Weg, der Kreis, der vollständige Graph, der vollständige bipartite Graph [10], der Hyperwürfel [23], der Gittergraph [11], spezielle Hamming-Graphen [26] und einige andere, vergleiche [8]. Allerdings gibt es noch viele Graphen, wo die Bandbreite unbekannt ist, wie beispielsweise allgemeine Hamming-Graphen, vergleiche hierzu [25, 3]. Weitere Anwendungen und eine Vielzahl von Resultaten zur Bandbreite von Graphen sind in den Übersichtsartikeln [8, 31] zu finden.

In den folgenden Abschnitten werden wir die Bandbreite des im Abschnitt 2.5 motivierten Graphen $G_{n,k,b}$ in Abhängigkeit des Parameters b bestimmen. Nach ein paar Vorbereitungen in Abschnitt 3.1 ermitteln wir in Abschnitt 3.2 zunächst mittels einer einfachen Nummerierung die asymptotische Bandbreite, wenn b sublinear mit n wächst. Mittels einer Symmetrisierung verbessern wir dann in Abschnitt 3.3 die Nummerierung und bestimmen damit die exakte Bandbreite für den Fall, dass $b \geq \frac{n+k-1}{2}$ gilt. Aufgrund der Komplexität des Sachverhalts wird der übrig gebliebene

Fall, dass $b < \frac{n+k-1}{2}$, aber b linear mit n wächst, in mehrere Unterabschnitte aufgeteilt. Zunächst beschreiben wir in Unterabschnitt 3.4.1 ein kontinuierliches Problem auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$, mit dessen Hilfe wir die asymptotische Bandbreite des Graphen untersuchen können. Mit Hilfe mehrdimensionaler Riemannintegrale und elementaren geometrischen Argumenten werden wir dann in den Unterabschnitten 3.4.2 und 3.4.3 obere beziehungsweise untere asymptotische Schranken für die Bandbreite angeben. In manchen der betrachteten Unterfälle stimmen diese auch überein, sodass wir hier auch teilweise die asymptotische Bandbreite bestimmen. Ähnliche Ideen, wie in Abschnitt 3.4 wurden auch schon von anderen Autoren benutzt. So nutzt Harper [24] beispielsweise eine kompliziertere Einbettung in ein kontinuierliches Problem im Einheitswürfel, um Schranken für die Bandbreite von Hamming-Graphen zu erhalten. Harpers Reduktion auf den Einheitswürfel wurde auch in [1] angewendet, um die Kantenbandbreite (Bandbreite des Kantengraphen zum betrachteten Graphen) von mehrdimensionalen Gittern und Hamming-Graphen zu ermitteln. Auch asymptotische Schranken für die Bandbreite von d -dimensionalen de Bruijn Graphen wurden in [39] mittels eines Ansatzes gefunden, der auf der Nutzung eines kontinuierlichen Bereiches beruht.

3.1 Elementare Eigenschaften von $G_{n,k,b}$

Wir erinnern nochmal an die Definition des Graphen $G_{n,k,b} = (V_{n,k,b}, E_{n,k,b})$ für $n, k, b \in \mathbb{N}$ mit $1 \leq k-1 \leq b \leq n$. Es ist

$$V_{n,k,b} = \left\{ X \in \binom{[0, n]}{k} : \overline{X} - \underline{X} \leq b \right\}$$

und

$$E_{n,k,b} = \left\{ \{X, Y\} \subseteq V_{n,k,b} : \overline{X \cup Y} - \underline{X \cup Y} \leq b \right\}.$$

Wir beginnen mit ein paar elementaren Eigenschaften dieses Graphen, die sich für die Bandbreitenbetrachtungen als nützlich erweisen.

Lemma 3.1.1. *Ist $b' \leq b$, so ist $G_{n,k,b'}$ ein Teilgraph von $G_{n,k,b}$ und es gilt $B(G_{n,k,b'}) \leq B(G_{n,k,b})$.*

Beweis. Nach Definition gilt sowohl $V_{n,k,b'} \subseteq V_{n,k,b}$ als auch $E_{n,k,b'} \subseteq E_{n,k,b}$, also ist $G_{n,k,b'}$ ein Teilgraph von $G_{n,k,b}$. Damit gilt auch $B(G_{n,k,b'}) \leq B(G_{n,k,b})$, denn für eine Bandbreitennummerierung f von $G_{n,k,b}$ ist $f' := f|_{V_{n,k,b'}}$ eine Nummerierung von $G_{n,k,b'}$ mit $B_{f'}(G_{n,k,b'}) \leq B(G_{n,k,b})$. \square

Lemma 3.1.2. *Seien X und Y zwei verschiedene Knoten von $G_{n,k,b}$. Sie sind genau dann benachbart, wenn $\overline{X} - \underline{Y} \leq b$ und $\overline{Y} - \underline{X} \leq b$ gilt.*

Beweis. Seien X und Y benachbart. Dann ist $\overline{X} - \underline{Y} \leq \overline{X \cup Y} - \underline{X \cup Y} \leq b$ und, analog, $\overline{Y} - \underline{X} \leq \overline{X \cup Y} - \underline{X \cup Y} \leq b$.

Nun seien $\overline{X} - \underline{Y} \leq b$ und $\overline{Y} - \underline{X} \leq b$. Dann gilt $\overline{X \cup Y} - \underline{X \cup Y} = \max\{\overline{X}, \overline{Y}\} - \min\{\underline{X}, \underline{Y}\} = \max\{\overline{X} - \underline{X}, \overline{X} - \underline{Y}, \overline{Y} - \underline{X}, \overline{Y} - \underline{Y}\} \leq b$. \square

Es ist $[i, i + k - 1] \in V_{n,k,b}$ genau dann, wenn $0 \leq i \leq n - (k - 1)$ gilt, und für $0 \leq i < j \leq n - (k - 1)$ sind die Knoten $[i, i + k - 1]$ und $[j, j + k - 1]$ genau dann benachbart, wenn $j \leq i + b - (k - 1)$ gilt.

Lemma 3.1.3. Sei $0 \leq i < j \leq n - (k - 1)$. Die Knoten $[i, i + k - 1]$ und $[j, j + k - 1]$ haben einen Abstand von $\lceil \frac{j-i}{b-k+1} \rceil$ in $G_{n,k,b}$.

Beweis. Sei $j - i = q(b - k + 1) + r$ wobei q eine ganze Zahl ist und $1 \leq r \leq b - k + 1$ gilt. Dann gilt $\lceil \frac{j-i}{b-k+1} \rceil = q + 1$. Die Knoten $[i, i + (k - 1)], [i + b - (k - 1), i + b], [i + 2b - 2(k - 1), i + 2b - (k - 1)], \dots, [i + qb - q(k - 1), i + qb - (q - 1)(k - 1)], [j, j + (k - 1)]$ bilden dann einen Weg der Länge $q + 1$ in $G_{n,k,b}$. Somit beträgt der Abstand höchstens $q + 1$. Wir nehmen nun an, dass die Knoten

$$X_0 = [i, i + (k - 1)], X_1, \dots, X_{l-1}, [j, j + (k - 1)] = X_l$$

einen Weg der Länge l in $G_{n,k,b}$ bilden. Dann haben wir für $t = 1, \dots, l$, $\overline{X}_t - \underline{X}_{t-1} \leq b$ und $\overline{X}_t - \underline{X}_t \geq k - 1$, was

$$\underline{X}_t - \underline{X}_{t-1} \leq b - (k - 1) \quad (3.1)$$

impliziert. Das Aufsummieren der Ungleichungen (3.1) für $t = 1, \dots, l$ führt auf $j - i \leq l(b - k + 1)$. Wegen $j - i > q(b - k + 1)$ haben wir $l \geq q + 1$ und somit ist der Abstand mindestens $q + 1$. \square

Korollar 3.1.1. Seien $X, Y \in V_{n,k,b}$ und sei $\underline{X} < \underline{Y}$ oder $\underline{X} = \underline{Y}$ sowie $\overline{X} < \overline{Y}$. Dann haben X und Y höchstens den Abstand $\lceil \frac{\overline{Y} - \underline{X} - b}{b - k + 1} \rceil + 1$.

Beweis. Seien $i = \underline{X}$ und $j = \overline{Y}$.

Fall 1. $j - i \leq b$. Dann ist $\overline{Y} - \underline{X} \leq b$ und $\overline{X} - \underline{Y} \leq \overline{X} - \underline{X} \leq b$. Folglich sind X und Y nach Lemma 3.1.2 benachbart und ihr Abstand ist 1. Aus den Bedingungen an X und Y folgt $\overline{Y} - \underline{X} > k - 1$ und deswegen gilt $\overline{Y} - \underline{X} - b > (-1)(b - k + 1)$, was $\lceil \frac{\overline{Y} - \underline{X} - b}{b - k + 1} \rceil + 1 = 1$ impliziert.

Fall 2. $j - i > b$. In diesem Fall ist X benachbart zu $X_1 = [i + b - k + 1, i + b]$ und Y benachbart zu $Y_1 = [j - b, j - b + k - 1]$.

Fall 2.1 $i + b - k + 1 \geq j - b$. Dann sind X_1 und Y benachbart, da $\overline{X}_1 - \underline{Y} = i + b - \underline{Y} = \underline{X} - \underline{Y} + b \leq b$ und $\overline{Y} - \underline{X}_1 = j - i - b + k - 1 \leq b$. Also haben X und Y einen Abstand von höchstens 2. Es gilt sogar $2 \leq \lceil \frac{\overline{Y} - \underline{X} - b}{b - k + 1} \rceil + 1 \leq \lceil \frac{b + (b - k + 1) - b}{b - k + 1} \rceil + 1 = 2$.

Fall 2.2 $i + b - k + 1 < j - b$. Nach Lemma 3.1.3 haben X_1 und Y_1 einen Abstand von $\lceil \frac{j - b - i - (b - k + 1)}{b - k + 1} \rceil = \lceil \frac{\overline{Y} - \underline{X} - b}{b - k + 1} \rceil - 1$ und demzufolge haben X und Y einen Abstand von höchstens $\lceil \frac{\overline{Y} - \underline{X} - b}{b - k + 1} \rceil + 1$. \square

Lemma 3.1.4. *Der Graph $G_{n,k,b}$ besitzt die folgende Knotenanzahl:*

$$|V_{n,k,b}| = (n - b + 1) \binom{b}{k-1} + \binom{b}{k} = (n + 1) \binom{b}{k-1} - (k - 1) \binom{b+1}{k}.$$

Beweis. Der Beweis folgt direkt aus der folgenden Zerlegung der Knotenmenge:

$$V_{n,k,b} = \bigcup_{i=0}^{n-b} \left\{ X \in \binom{[i, i+b]}{k} : \underline{X} = i \right\} \cup \left\{ X \in \binom{[n-b+1, n]}{k} \right\}.$$

□

Im Folgenden werden wir häufig die Elemente von $V_{n,k,b}$ als k -Tupel in aufsteigender Reihenfolge auffassen, also $X = (i_1, \dots, i_k)$ mit $i_1 < \dots < i_k$. Dann ist $\underline{X} = i_1$ und $\overline{X} = i_k$. Weiterhin seien

$$\overleftarrow{X} = (i_k, \dots, i_1), \quad (3.2)$$

$$X^c = (n - i_k, \dots, n - i_1). \quad (3.3)$$

Weiter erinnern wir an die Definition der *lexikographischen Ordnung* $<_{lex}$. Seien $X = (x_1, x_2, \dots, x_p)$ und $Y = (y_1, y_2, \dots, y_q)$ zwei nicht notwendigerweise gleichlange Tupel reeller Zahlen. Dann ist X *lexikographisch kleiner als* Y ($X <_{lex} Y$), wenn

1. entweder eine ganze Zahl j mit $1 \leq j \leq \min(p, q)$ existiert, sodass $x_i = y_i$ für alle $i = 1, \dots, j-1$ und $a_j < b_j$ gilt oder
2. $p < q$ und $a_i = b_i$ für alle $i = 1, \dots, p$ gilt.

Vergleiche hierzu [13]. Zunächst brauchen wir nur den Fall $p = q = k$, womit der zweite Punkt wegfällt. In Abschnitt 3.5 wird jedoch diese allgemeine Version benötigt.

3.2 Asymptotik der Bandbreite von $G_{n,k,b}$ im Fall $b = o(n)$

In diesem Abschnitt betrachten wir den Fall, dass b sublinear bezüglich n wächst. Dazu erinnern wir an einige Notationen der Asymptotik. Seien f, g positive reelle Folgen, also $f, g : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}_+$. Dann gilt

$$f = o(g) : \Longleftrightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(n)}{g(n)} = 0, \quad (3.4)$$

$$f \sim g : \Longleftrightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(n)}{g(n)} = 1, \quad (3.5)$$

$$f = O(g) : \Longleftrightarrow \exists c \in \mathbb{R}, \text{ sodass } f(n) \leq c \cdot g(n) \text{ für alle } n, \quad (3.6)$$

$$f \lesssim g : \Longleftrightarrow f(n) \leq (1 + o(1))g(n). \quad (3.7)$$

Vergleiche hierzu [17]. Das zentrale Resultat dieses Abschnitts ist der folgende Satz, welcher in mehreren Schritten bewiesen wird.

Satz 3.2.1. Sei k eine feste positive ganze Zahl und $1 \leq k-1 \leq b \leq n$. Wenn $b = o(n^{\frac{1}{k+1}})$ ist, dann gilt für hinreichend großes n

$$B(G_{n,k,b}) = k \binom{b}{k}.$$

Wenn $b = o(n)$ ist, dann gilt

$$B(G_{n,k,b}) \sim k \binom{b}{k} \text{ für } n \rightarrow \infty.$$

Zunächst stellen wir eine einfache Nummerierung vor, die eine obere Schranke für die Bandbreite liefert.

Lemma 3.2.1. Seien n, k, b ganze Zahlen mit $1 \leq k-1 \leq b \leq n$. Dann gilt

$$B(G_{n,k,b}) \leq k \binom{b}{k}.$$

Beweis. Wir ordnen die Knoten von $G_{n,k,b}$ lexikographisch an, siehe Seite 55. Sei $f_{lex}(X)$ die Nummer von $X \in V_{n,k,b}$ bezüglich dieser Ordnung. Nun seien X und Y zwei benachbarte Knoten mit $X <_{lex} Y$ und seien $X' = [\underline{X}, \underline{X} + k - 1]$ und

$$Y' = \begin{cases} [\underline{X} + b - k + 1, \underline{X} + b], & \text{falls } \underline{X} + b \leq n \\ [n - k + 1, n], & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Fallunterscheidung bei Y' ist notwendig, da $[\underline{X} + b - k + 1, \underline{X} + b]$ für $\underline{X} + b > n$ kein Knoten aus $V_{n,k,b}$ ist. In diesem Fall definieren wir Y' als $[n - k + 1, n]$, den lexikographisch größten Knoten aus $V_{n,k,b}$. Dann ist

$$X' \leq_{lex} X <_{lex} Y \leq_{lex} Y'. \quad (3.8)$$

Außerdem gilt für $j \in [0, n - b]$

$$|\{X \in V_{n,k,b} : \underline{X} = j\}| = \binom{b}{k-1}.$$

und, für $j \in [n - b + 1, n]$,

$$|\{X \in V_{n,k,b} : \underline{X} = j\}| \leq \binom{b}{k-1}.$$

Da Y' der lexikographisch kleinste Knoten mit kleinstem Element \underline{Y}' ist, wobei $\underline{Y}' \leq \underline{X} + b - k + 1$ gilt, folgt

$$|f_{lex}(Y') - f_{lex}(X')| \leq (b - k + 1) \binom{b}{k-1} = k \binom{b}{k}. \quad (3.9)$$

Nun implizieren (3.8) und (3.9)

$$|f_{lex}(Y) - f_{lex}(X)| \leq k \binom{b}{k},$$

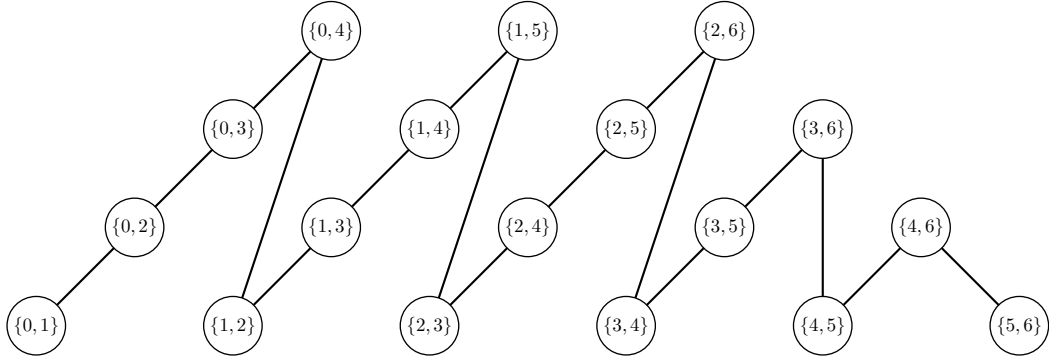


Abb. 3.2.1: $V_{6,2,4}$ mit aufsteigendem Weg vom Knoten mit der kleinsten Nummer ($\{0, 1\}$) zum Knoten mit der größten Nummer ($\{5, 6\}$) bezüglich der lexikographischen Ordnung.

was die Behauptung beweist. \square

Ein kleines Beispiel zur lexikographischen Ordnung findet sich in Abbildung 3.2.1.

Chvátal zeigte in [10], dass eine untere Schranke für die Bandbreite durch

$$B(G) \geq \left\lceil \frac{|V| - 1}{\text{diam}(G)} \right\rceil \quad (3.10)$$

gegeben ist. Hier ist der *Durchmesser* $\text{diam}(G)$ des Graphen $G = (V, E)$ der maximale graphentheoretische Abstand zweier beliebiger Knoten von G .

Nach Korollar 3.1.1 beträgt der Abstand zweier beliebiger Knoten von $G_{n,k,b}$ höchstens $\left\lceil \frac{n-0-b}{b-k+1} \right\rceil + 1 = \left\lceil \frac{n-k+1}{b-k+1} \right\rceil$ und nach Lemma 3.1.3 haben die Knoten $[0, k-1]$ und $[n-k+1, n]$ einen Abstand von $\left\lceil \frac{n-k+1}{b-k+1} \right\rceil$. Dementsprechend gilt

$$\text{diam}(G_{n,k,b}) = \left\lceil \frac{n-k+1}{b-k+1} \right\rceil. \quad (3.11)$$

Damit können wir nun Satz 3.2.1 beweisen.

Beweis von Satz 3.2.1. Aus Lemma 3.2.1 wissen wir, dass

$$B(G_{n,k,b}) \leq k \binom{b}{k}$$

gilt. Für die untere Schranke nutzen wir die Tatsache, dass $\binom{b}{k} = \frac{b^k}{k!} + O(b^{k-1})$ für $b \rightarrow \infty$ ist. Wegen Lemma 3.1.4, (3.10) und (3.11) gilt für $n \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} B(G_{n,k,b}) &\geq \left\lceil \frac{|V_{n,k,b}| - 1}{\text{diam}(G_{n,k,b})} \right\rceil = \left\lceil \frac{(n-b+1)\binom{b}{k-1} + \binom{b}{k} - 1}{\left\lceil \frac{n-k+1}{b-k+1} \right\rceil} \right\rceil = \frac{n\binom{b}{k-1} + O(b^k)}{\frac{n-k+1}{b-k+1} + O(1)} \\ &= \frac{nk\binom{b}{k} + O(b^{k+1})}{n + O(b)} = \frac{k\binom{b}{k} + O(\frac{b^{k+1}}{n})}{1 + O(\frac{b}{n})}. \end{aligned}$$

Im Falle von $b = o(n^{\frac{1}{k+1}})$ ergibt sich

$$\frac{k\binom{b}{k} + O(\frac{b^{k+1}}{n})}{1 + O(\frac{b}{n})} \geq \left(k\binom{b}{k} + o(1)\right) \left(1 - O\left(\frac{b}{n}\right)\right) = k\binom{b}{k} - o(1).$$

Demzufolge ist $B(G_{n,k,b}) \geq k \binom{b}{k}$ für hinreichend großes n , was den ersten Teil der Behauptung zeigt.

Falls $b = o(n)$ ist, dann gilt

$$\frac{k \binom{b}{k} + O\left(\frac{b^{k+1}}{n}\right)}{1 + O\left(\frac{b}{n}\right)} \sim k \binom{b}{k},$$

was zeigt, dass $B(G_{n,k,b}) \gtrsim k \binom{b}{k}$ für $n \rightarrow \infty$, was den zweiten Teil der Behauptung zeigt. \square

Nachdem wir in diesem Abschnitt im Vergleich zu n „kleine“ b betrachtet haben, untersuchen wir im nächsten Abschnitt „große“ b , konkret $b \geq \frac{n+k-1}{2}$. Es wird sich herausstellen, dass die lexikographische Anordnung dort nicht optimal ist, wir sie aber dazu verwenden können, um eine neue, für diesen Fall optimale, Anordnung zu definieren.

3.3 Bandbreite von $G_{n,k,b}$ im Fall $b \geq \frac{n+k-1}{2}$

Das zentrale Resultat dieses Abschnitts ist der folgende Satz, zu dessen Beweis einige Teilaussagen beitragen.

Satz 3.3.1. *Sei k eine feste positive ganze Zahl und es gelte $1 \leq k-1 \leq b \leq n$. Wenn $b \geq \frac{n+k-1}{2}$ gilt, dann ist*

$$B(G_{n,k,b}) = \left\lceil \frac{(n-b+1) \binom{b}{k-1} + \binom{b}{k} + \binom{2b-n+1}{k} - 2}{2} \right\rceil.$$

Die Idee hier ist, die Bandbreite nach oben durch eine Modifikation der Nummerierung aus dem letzten Abschnitt zu beschränken. Dabei wird die Knotenmenge in drei Teilmengen zerlegt, auf denen dann die Knoten nach unterschiedlichen Kriterien angeordnet werden. Zentral für diesen Abschnitt ist die Existenz von Knoten, die zu allen anderen Knoten im Graphen benachbart sind. Diese fassen wir in der Menge

$$C = \{X \in V_{n,k,b} : n-b \leq \underline{X} \leq \overline{X} \leq b\}$$

zusammen.

Bemerkung 3.3.1. *Es ist $C \neq \emptyset$ genau dann, wenn $b \geq \frac{n+k-1}{2}$ gilt. Es ist*

$$|C| = \binom{2b-n+1}{k}. \quad (3.12)$$

Wir bezeichnen die Menge der restlichen Knoten mit $R = V_{n,k,b} \setminus C$ und teilen sie wie folgt weiter auf:

$$\begin{aligned} R' &= \{X \in R : \underline{X} + \overline{X} \neq n\}, \\ R'' &= \{X \in R : \underline{X} + \overline{X} = n\}. \end{aligned}$$

Sei $R'' = R_0'' \cup R_1''$ eine Zerlegung von R'' , sodass

$$||R_0''| - |R_1''|| \leq 1 \quad (3.13)$$

ist. Diese Zerlegung ist abgesehen von der Größe der beiden Mengen völlig beliebig. Dabei betrachten wir die Zerlegungen $R'' = R_0'' \cup R_1''$ und $R'' = R_1'' \cup R_0''$ als verschieden voneinander. Zerlegungen mit Eigenschaft (3.13) nennen wir *balanciert*. Weiterhin definieren wir eine Zerlegung $R' = R_0' \cup R_1'$ von R' durch

$$\begin{aligned} R_0' &= \{X \in R' : \underline{X} + \overline{X} < n\}, \\ R_1' &= \{X \in R' : \underline{X} + \overline{X} > n\} \end{aligned}$$

und mit $R_0 = R_0' \cup R_0''$ und $R_1 = R_1' \cup R_1''$ haben wir eine Zerlegung $R = R_0 \cup R_1$ von R .

Lemma 3.3.1. *Es ist $||R_0| - |R_1|| \leq 1$.*

Beweis. Die Abbildung $X \mapsto X^c$ ist eine Bijektion von R_0' auf R_1' . Demzufolge ist $|R_0'| = |R_1'|$ und mit (3.13) erhalten wir die Behauptung. \square

Damit ist $R = R_0 \cup R_1$ auch eine balancierte Zerlegung. Wir definieren nun eine Nummerierung der Knoten von $V_{n,k,b}$ in der Form einer Totalordnung \leq . Das kleinste Element bekommt die Nummer 1, die nächsten Elemente bekommen die Nummern 2, 3, ... und das maximale Element bekommt die Nummer $|V_{n,k,b}|$. Die Totalordnung werden wir in Form einer ordinalen Summe von Teilordnungen angeben: Wenn $V_{n,k,b} = S_1 \cup \dots \cup S_l$ und \leq_i eine Totalordnung auf S_i ist, $i = 1, \dots, l$, dann bedeutet $V_{n,k,b} = S_1 \oplus \dots \oplus S_l$, dass die Elemente von $V_{n,k,b}$ wie folgt total geordnet sind: $X \leq Y$, wenn es ein i mit $X, Y \in S_i$ und $X \leq_i Y$ gibt oder wenn i, j mit $i < j$ und $X \in S_i$ sowie $Y \in S_j$ existieren. Hier haben wir $V_{n,k,b} = R_0 \cup C \cup R_1$, also $l = 3$ mit $S_1 = R_0$, $S_2 = C$ und $S_3 = R_1$. Wir definieren die Totalordnung $\leq_{spo(R_0'', R_1'')}$ mit $R'' = R_0'' \cup R_1''$ und (3.13), welche wir *einfache Palindromordnung zur Zerlegung* $R'' = R_0'' \cup R_1''$ (englisch: simple palindrom ordering (SPO)) nennen, wie folgt:

$$V_{n,k,b} = R_0 \oplus C \oplus R_1,$$

mit den folgenden Teilordnungen:

1. $\forall X, Y \in R_0 = R_0' \cup R_0'' : X \leq_{spo(R_0'', R_1'')} Y$, wenn $X \leq_{lex} Y$.

2. $\forall X, Y \in C: X \leq_{spo(R_0'', R_1'')} Y$, wenn $X \leq_{lex} Y$.
3. $\forall X, Y \in R_1 = R_1' \cup R_1'': X \leq_{spo(R_0'', R_1'')} Y$, wenn $\overleftarrow{X} \leq_{lex} \overleftarrow{Y}$.

Wenn die balancierte Zerlegung $R'' = R_0'' \cup R_1''$ beliebig gewählt werden kann, so werden wir im weiteren Verlauf zur Abkürzung \leq_{spo} schreiben. Die einfache Palindromordnung zur Zerlegung $R'' = \{\{1, 5\}\} \cup \emptyset$ wird in Abbildung 3.3.1 veranschaulicht.

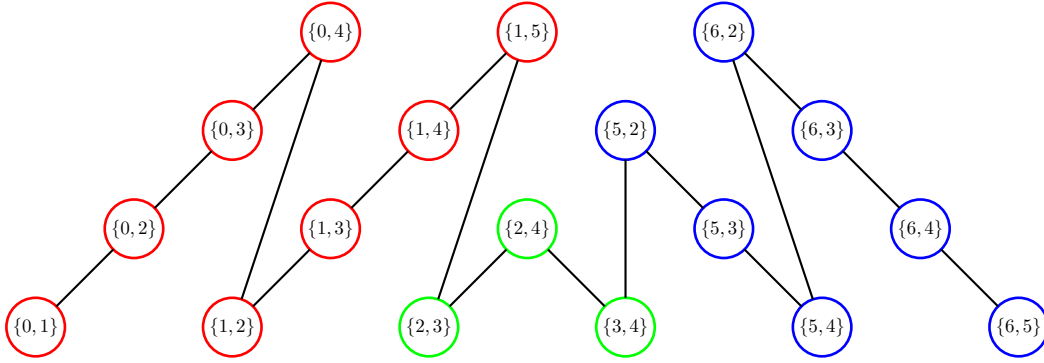


Abb. 3.3.1: $V_{6,2,4}$ mit aufsteigendem Weg vom Knoten mit der kleinsten Nummer ($\{0, 1\}$) zum Knoten mit der größten Nummer ($\{5, 6\}$) bezüglich der einfachen Palindromordnung zur Zerlegung $R'' = \{\{1, 5\}\} \cup \emptyset$. Die Knoten sind dabei der Zerlegung $V_{6,2,4} = R_0 \cup C \cup R_1$ entsprechend eingefärbt.

Sei $f_{spo(R_0'', R_1'')}(X)$ die Nummer von $X \in V_{n,k,b}$ in der einfachen Palindromordnung zur Zerlegung $R'' = R_0'' \cup R_1''$. Wir erinnern daran, dass die $f_{spo(R_0'', R_1'')}$ -Distanz von $X, Y \in V_{n,k,b}$ gegeben ist durch

$$d_{f_{spo(R_0'', R_1'')}}(X, Y) = |f_{spo(R_0'', R_1'')}(X) - f_{spo(R_0'', R_1'')}(Y)|.$$

Lemma 3.3.2. Sei \leq_{spo} eine einfache Palindromordnung zu einer beliebigen balancierten Zerlegung $R'' = A \cup B$. Seien X, Y zwei benachbarte Knoten aus $V_{n,k,b}$ mit $X <_{spo} Y$ und maximaler f_{spo} -Distanz, wobei zusätzlich \underline{X} minimal oder \overline{Y} maximal ist. Dann ist $X = [0, k-1]$ und $Y = [b-k+1, b]$ oder $X = [n-b, n-b+k-1]$ und $Y = [n-k+1, n]$.

Beweis. Wenn $Y \in C$ ist, dann haben $X = [0, k-1]$ und $Y = [b-k+1, b]$ maximale f_{spo} -Distanz. Analog dazu haben $X = [n-b, n-b+k-1]$ und $Y = [n-k+1, n]$ maximale f_{spo} -Distanz, wenn $X \in C$ ist. Es ist nicht möglich, dass X und Y beide in R_0 oder beide in R_1 liegen, da in diesen Fällen Y durch $[b-k+1, b]$ beziehungsweise X durch $[n-b, n-b+k-1]$ ersetzt werden kann. Also bleibt der Fall, dass $X \in R_0$ und $Y \in R_1$ liegt. Um eine maximale f_{spo} -Distanz zu erreichen, ist die Form $X = (\underline{X}, \underline{X}+1, \dots, \underline{X}+k-1)$ und $Y = (\overline{Y}-k+1, \overline{Y}-k+2, \dots, \overline{Y})$ mit $\overline{Y} - \underline{X} = b$ notwendig. Das ergibt $X = [i, i+k-1]$ und $Y = [i+b-k+1, i+b]$ für ein $i \in [0, n-b]$. Um die Behauptung zu beweisen, ist es nun ausreichend, das Folgende zu zeigen:

a) Für $1 \leq i \leq \frac{n-b}{2}$ gilt

$$d_{spo}([i-1, i+k-2], [i+b-k, i+b-1]) \geq d_{spo}([i, i+k-1], [i+b-k+1, i+b]).$$

b) Für $\frac{n-b}{2} < i \leq n-b$ gilt

$$d_{spo}([i-1, i+k-2], [i+b-k, i+b-1]) \leq d_{spo}([i, i+k-1], [i+b-k+1, i+b]).$$

Wir definieren $I_i = \{X \in V_{n,k,b} : [i, i+k-1] \leq_{spo} X \leq_{spo} [i+b-k+1, i+b]\}$. Zunächst bemerken wir, dass $C \subseteq I_i$ für alle $i \in [0, n-b]$ ist, da $[n-b, n-b+k-1]$ das lexikographisch kleinste und $[b-k+1, b]$ das lexikographisch größte Element aus C ist. Um die Ungleichung in Teil a) zu zeigen, genügt es zu beweisen, dass die Abbildung $X = (i_1, i_2, \dots, i_k) \mapsto (i_1-1, i_2-1, \dots, i_k-1) = \tilde{X}$ eine Injektion ϕ von I_i nach I_{i-1} ist. Die Injektivität ist klar. Damit bleibt zu zeigen, dass $\tilde{X} = \phi(X) \in I_{i-1}$ gilt, falls $X \in I_i$ ist.

Fall 1. $\tilde{X} \in C$.

Dieser Fall ist einfach, da $C \subseteq I_j$ für alle j gilt.

Fall 2. $\tilde{X} \in R_0$.

1. Falls $X \in R_0$ ist, dann gilt $[i, i+k-1] \leq_{lex} X$ und somit $[i-1, i+k-2] \leq_{lex} \tilde{X}$, was $\tilde{X} \in I_{i-1}$ ergibt.
2. Falls $X \in C$ ist, dann gilt $i \leq \frac{n-b}{2} < n-b \leq \underline{X}$ und somit $i-1 < \underline{X}-1 = \underline{\tilde{X}}$. Das impliziert $[i-1, i+k-2] <_{lex} \tilde{X}$, was zu $\tilde{X} \in I_{i-1}$ führt.
3. Falls $X \in R_1$ ist, dann gilt, wegen $X \leq_{spo} [i+b-k+1, i+b]$, $\overline{X} \leq \overline{[i+b-k+1, i+b]} = i+b$ und wegen $\underline{X} + \overline{X} \geq n$ haben wir $\underline{X} \geq n-i-b$. Dies impliziert, wegen $i \leq \frac{n-b}{2}$, $\underline{\tilde{X}} = \underline{X}-1 \geq n-i-b-1 \geq i-1$. Folglich gilt $\tilde{X} \in I_{i-1}$.

Fall 3. $\tilde{X} \in R_1$.

1. Der Fall $X \in R_0$ ist nicht möglich, da $\underline{\tilde{X}} + \overline{\tilde{X}} = \underline{X} + \overline{X} - 2 < n$ gilt, was im Widerspruch zu $\tilde{X} \in R_1$ steht.
2. Sei $X \in C$. Dann ist $\overline{X} \leq b$, was, wegen $i \geq 1$, $\overline{\tilde{X}} \leq b-1 \leq i+b-2 < \overline{[i+b-k, i+b-1]}$ impliziert. Demzufolge ist $\overleftarrow{\tilde{X}} <_{lex} \overleftarrow{[i+b-k, i+b-1]}$, was $\tilde{X} \in I_{i-1}$ ergibt.
3. Falls $X \in R_1$ ist, dann gilt $\overline{X} \leq i+b$ und somit $\overline{\tilde{X}} \leq i+b-1$. Dies impliziert $\overleftarrow{\tilde{X}} \leq_{lex} \overleftarrow{[i+b-k, i+b-1]}$ und somit gilt $\tilde{X} \in I_{i-1}$.

Bis hierhin hat die Zerlegung, zu der die einfache Palindromordnung definiert ist, keine Rolle gespielt. Um Teil b) zu zeigen, benötigen wir die Symmetrie der Ordnung auf R'_0 und R'_1 und die Zerlegung, zu der die Ordnung definiert ist. Dazu betrachten

wir wieder die Bijektion $X \mapsto X^c$. Nach Definition von X^c in (3.3) und der einfachen Palindromordnung zur Zerlegung $R'' = A \cup B$ gilt für $X, X' \in R_0 \cup R_1$ die folgende Äquivalenz:

$$X \leq_{spo(A,B)} X' \iff X'^c \leq_{spo(B,A)} X^c.$$

Wir erinnern daran, dass wir die Zerlegungen $R'' = A \cup B$ und $R'' = B \cup A$ als verschieden voneinander betrachten. Das Vertauschen von A und B führt also dazu, dass die Elemente aus A jetzt in R_1 und die Elemente aus B in R_0 liegen, womit wir eine einfache Palindromordnung zu einer anderen Zerlegung haben. Dies ist notwendig, da die Ordnung nicht komplett symmetrisch ist. Wegen $X = X^c$ für alle $X \in R''$ würde die obige Äquivalenz ohne die Modifikation nicht gelten. Jedoch sind die konkrete Zerlegung von R'' sowie die Ordnung auf C , abgesehen vom minimalen und maximalen Element von C , für den Beweis von Teil a) irrelevant. Damit können die Argumente aus dem Beweis von Teil a) nach Anwendung der Abbildung $X \mapsto X^c$ auf die einfache Palindromordnung zur Zerlegung $R'' = B \cup A$ angewendet werden, was zum Beweis von Teil b) genügt. \square

Als erste Anwendung dieses Lemmas zeigen wir, dass die Bandbreite von $f_{spo(\{\{1,5\}\}, \emptyset)}$ für den Beispielgraph $G_{6,2,4}$ aus den Abbildungen 3.2.1 und 3.3.1 kleiner ist als die Bandbreite von f_{lex} . Nach Lemma 3.3.2 gilt

$$\begin{aligned} B_{f_{spo(\{\{1,5\}\}, \emptyset)}}(G_{6,2,4}) &= \max\{d_{f_{spo(\{\{1,5\}\}, \emptyset)}}(\{0, 1\}, \{3, 4\}), d_{f_{spo(\{\{1,5\}\}, \emptyset)}}(\{2, 3\}, \{5, 6\})\} \\ &= 10. \end{aligned}$$

Hingegen gilt $B_{f_{lex}}(G_{6,2,4}) = d_{f_{lex}}(\{0, 1\}, \{3, 4\}) = 12$. Die Einführung der einfachen Palindromordnung ist für den Fall $b \geq \frac{n+k-1}{2}$ also sinnvoll.

Nun kann die Bandbreite von f_{spo} zu einer beliebigen balancierten Zerlegung für den betrachteten Fall auch allgemein bestimmt werden:

Lemma 3.3.3. *Sei \leq_{spo} eine einfache Palindromordnung zu einer beliebigen balancierten Zerlegung $R'' = A \cup B$. Dann gilt $B_{f_{spo}}(G_{n,k,b}) = \left\lceil \frac{|V_{n,k,b}| + |C| - 2}{2} \right\rceil$.*

Beweis. Wir haben $f_{spo}([0, k-1]) = 1$ und $f_{spo}([n-k+1, n]) = |V_{n,k,b}|$. Falls $f_{spo}([n-b, n-b+k-1]) = u+1$ ist, dann ist $f_{spo}([b-k+1, b]) = u + |C|$. Wegen Lemma 3.3.1 haben wir $|u - (|V_{n,k,b}| - |C| - u)| \leq 1$ und somit $|(u + |C| - 1) - (|V_{n,k,b}| - u - 1)| \leq 1$. Lemma 3.3.2 impliziert, dass eine der f_{spo} -Distanzen $d_{f_{spo}}([0, k-1], [b-k+1, b]) = u + |C| - 1$ und $d_{f_{spo}}([n-b, n-b+k-1], [n-k+1, n]) = |V_{n,k,b}| - u - 1$ die maximale f_{spo} -Distanz ist. Da sie sich höchstens um 1 unterscheiden, erhalten wir

$$B_{f_{spo}}(G_{n,k,b}) = \left\lceil \frac{u + |C| - 1 + |V_{n,k,b}| - u - 1}{2} \right\rceil = \left\lceil \frac{|V_{n,k,b}| + |C| - 2}{2} \right\rceil.$$

\square

Nun sind wir in der Lage, Satz 3.3.1 zu beweisen.

Beweis von Satz 3.3.1. Wir wissen aus Lemma 3.3.3, dass $B(G_{n,k,b}) \leq \left\lceil \frac{|V_{n,k,b}| + |C| - 2}{2} \right\rceil$. Sei f eine beliebige Nummerierung von $G_{n,k,b}$. Seien X_V der Knoten mit Nummer 1 und X^V der Knoten mit Nummer $|V_{n,k,b}|$. Weiter seien X_C der Knoten aus C mit der kleinsten Nummer, bezeichnet mit α , und X^C der Knoten von C mit der größten Nummer, bezeichnet mit β . Dann gilt $\beta - \alpha \geq |C| - 1$. Außerdem sind sowohl X_V und X^C als auch X_C und X^V benachbart mit $d_f(X_V, X^C) = \beta - 1$ und $d_f(X_C, X^V) = |V_{n,k,b}| - \alpha$. Die Summe der beiden f -Distanzen ist

$$s = (\beta - 1) + (|V_{n,k,b}| - \alpha) = |V_{n,k,b}| + (\beta - \alpha) - 1 \geq |V_{n,k,b}| + |C| - 2.$$

Das Maximum der beiden f -Distanzen ist deswegen mindestens $\left\lceil \frac{|V_{n,k,b}| + |C| - 2}{2} \right\rceil$. Mit Lemma 3.1.4 und (3.12) erhalten wir

$$B(G_{n,k,b}) = \left\lceil \frac{(n - b + 1) \binom{b}{k-1} + \binom{b}{k} + \binom{2b-n+1}{k} - 2}{2} \right\rceil.$$

□

Die Argumentation baut entscheidend darauf auf, dass $C \neq \emptyset$ ist. Wenn also $b < \frac{n+k-1}{2}$ gilt, aber b trotzdem im Vergleich zu n hinreichend groß ist, so kann man vermuten, dass es bessere Anordnungen gibt. Dies ist auch tatsächlich der Fall, wie wir im folgenden Abschnitt sehen werden.

3.4 Asymptotik der Bandbreite von $G_{n,k,b}$ im Fall $b \sim \beta n$ mit $\beta \in (0, 0.5]$

Wir beginnen hier mit der Beschreibung eines kontinuierlichen Problems, das sich für die Bestimmung der asymptotischen Bandbreite als hilfreich erweisen wird. Die Idee dabei ist, für einen Knoten $X \in V_{n,k,b}$ das Minimum \underline{X} und das Maximum \overline{X} durch Division durch n jeweils auf einen Wert im Intervall $[0, 1]$ zu normieren. Diese werden als x - beziehungsweise y -Koordinate im Einheitsquadrat $[0, 1]^2$ betrachtet. Für hinreichend großes n kann dann die Anzahl der Knoten in einer messbaren Teilmenge $P \in [0, 1]^2$ durch ein Integral über P approximiert werden. Die Definition von bestimmten Polygonen im Einheitsquadrat ermöglicht dann über die Auswertung der Integrale die asymptotische Bandbreitenberechnung von $G_{n,k,b}$.

3.4.1 Approximation durch ein Problem auf dem Einheitsquadrat

Lemma 3.4.1. *Seien $b \sim \beta n$, $\delta > 0$, $X, Y \in V_{n,k,b}$ und $\overline{Y} - \underline{X} \lesssim i(1 - \delta)\beta n$ sowie $\overline{X} - \underline{Y} \lesssim i(1 - \delta)\beta n$, wobei wir $n \rightarrow \infty$ betrachten und i eine positive ganze Zahl ist. Wenn n hinreichend groß ist, so haben X und Y einen Abstand von höchstens i .*

Beweis. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei $(\underline{X}, \overline{X}) \leq_{lex} (\underline{Y}, \overline{Y})$, das heißt $\underline{X} < \underline{Y}$ oder sowohl $\underline{X} = \underline{Y}$ als auch $\overline{X} < \overline{Y}$. Nach Korollar 3.1.1 haben X und Y einen Abstand von höchstens $\lceil \frac{i(1-\delta)\beta n - b}{b-k+1} \rceil + 1 = \lceil \frac{i(1-\delta)\beta - \beta + o(1)}{\beta + o(1)} \rceil + 1 = \lceil i(1-\delta) - 1 + o(1) \rceil + 1 \leq i$. \square

Sei P ein Polygon in $\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq x \leq y \leq 1\}$ und sei $\text{int}(P)$ das Innere von P . Seien zudem

$$\begin{aligned} V_{n,k}(P) &= \left\{ X \in \binom{[0, n]}{k} : \frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X}) \in P \right\}, \\ V_{n,k}^o(P) &= \left\{ X \in \binom{[0, n]}{k} : \frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X}) \in \text{int}(P) \right\}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Lemma 3.4.2. *Es gilt*

$$|V_{n,k}^o(P)| \sim |V_{n,k}(P)| \sim \left(\frac{1}{(k-2)!} \iint_P (y-x)^{k-2} dx dy \right) n^k \text{ für } n \rightarrow \infty.$$

Beweis. Seien i, j ganze Zahlen mit $0 \leq i \leq j \leq n$. Da wir noch $k-2$ aus den $j-i-1$ Zahlen beliebig auswählen können, um ein Element $X \in \binom{[0, n]}{k}$ zu erhalten, wenn $\underline{X} = i$ und $\overline{X} = j$ bereits vorgegeben sind, gilt

$$|\{X \in \binom{[0, n]}{k} : \underline{X} = i, \overline{X} = j\}| = \binom{j-i-1}{k-2}.$$

Demzufolge gilt

$$|V_{n,k}(P)| = \sum_{\frac{1}{n}(i,j) \in P} \binom{j-i-1}{k-2} = \sum_{\frac{1}{n}(i,j) \in P} \left(n \left(\frac{j}{n} - \frac{i}{n} \right) - 1 \right).$$

Für $0 \leq z \leq 1$ und $n \in \mathbb{N}$ mit $nz \in \mathbb{N}$ ist

$$\binom{nz-1}{k-2} = \frac{(nz-1)(nz-2) \cdots (nz-1-(k-3))}{(k-2)!} \leq \frac{z^{k-2}}{(k-2)!} n^{k-2}.$$

Dementsprechend haben wir dann

$$\frac{1}{n^k} |V_{n,k}(P)| \leq \frac{1}{(k-2)!} \sum_{\frac{1}{n}(i,j) \in P} \frac{1}{n^2} \left(\frac{j}{n} - \frac{i}{n} \right)^{k-2}.$$

Die rechte Seite ist eine Riemann-Summe für das Integral $\iint_P (y-x)^{k-2} dx dy$, was zeigt, dass

$$|V_{n,k}(P)| \lesssim \left(\frac{1}{(k-2)!} \iint_P (y-x)^{k-2} dx dy \right) n^k \text{ für } n \rightarrow \infty.$$

Für $\delta > 0$ sei $P_\delta = \{(x, y) \in P : y-x \geq \delta\}$. Offensichtlich ist $P_\delta \subseteq P$. Außerdem gibt es für beliebiges $\varepsilon > 0$ ein $\delta > 0$, sodass

$$\iint_{P_\delta} (y-x)^{k-2} dx dy \geq (1-\varepsilon) \iint_P (y-x)^{k-2} dx dy.$$

Weiterhin gibt es ein $n_0 \in \mathbb{N}$, sodass für alle $n > n_0$ und alle $z \geq \delta$ gilt

$$\frac{k-2}{nz} \leq \varepsilon.$$

Daraus folgt

$$(1-\varepsilon)^{k-2} \frac{(nz)^{k-2}}{(k-2)!} \leq \left(1 - \frac{k-2}{nz}\right)^{k-2} \frac{(nz)^{k-2}}{(k-2)!} = \frac{(nz-1-(k-3))^{k-2}}{(k-2)!} \leq \binom{nz-1}{k-2}$$

und weiter

$$\begin{aligned} \frac{1}{n^k} |V_{n,k}(P)| &\geq (1-\varepsilon)^{k-2} \frac{1}{(k-2)!} \sum_{\frac{1}{n}(i,j) \in P_\delta} \frac{1}{n^2} \left(\frac{j}{n} - \frac{i}{n}\right)^{k-2} \\ &\gtrsim (1-\varepsilon)^{k-1} \frac{1}{(k-2)!} \iint_P (y-x)^{k-2} dx dy. \end{aligned}$$

Mit $\varepsilon \rightarrow 0$ erhalten wir nun

$$|V_{n,k}(P)| \gtrsim \left(\frac{1}{(k-2)!} \iint_P (y-x)^{k-2} dx dy \right) n^k \text{ für } n \rightarrow \infty.$$

Die Argumentation für $|V_{n,k}^o(P)|$ ist identisch. \square

Zur übersichtlicheren Darstellung definieren wir das *Maß des Polygons* $P \subseteq \Omega$ durch

$$\mu(P) = \frac{1}{(k-2)!} \iint_P (y-x)^{k-2} dx dy. \quad (3.15)$$

Korollar 3.4.1. Wenn $S \subseteq \binom{[0,n]}{k}$ eine Familie von Mengen ist, die alle $X \in \binom{[0,n]}{k}$ mit $\frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X}) \in \text{int}(P)$ und einige $X \in \binom{[0,n]}{k}$ mit $\frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X})$ auf dem Rand von P enthält, dann ist

$$|S| \sim \mu(P) n^k \text{ für } n \rightarrow \infty.$$

Beweis. Dies folgt wegen $V_{n,k}^o(P) \subseteq S \subseteq V_{n,k}(P)$ direkt aus Lemma 3.4.2. \square

Nach diesen Vorbereitungen können wir uns an das zentrale Resultat dieses Abschnitts heranwagen.

Satz 3.4.1. Sei $k \geq 2$ eine feste positive ganze Zahl. Sei $b \sim \beta n$ für $n \rightarrow \infty$ und sei $1 = q\beta + r$, wobei $q \geq 2$ eine positive ganze Zahl ist und $0 \leq r < \beta$ gilt. Seien

$$\begin{aligned} c_1(\beta, k) &= \frac{\beta^k}{k!} \left(k - \frac{k-1}{q} \right), \\ c_2(\beta, k) &= \frac{\beta^{k-1}}{(q+1)k!} (k - (k-1)\beta), \\ c_3(\beta, k) &= \frac{(\beta-r)^k}{(q+1)k!} q^{k-1}. \end{aligned}$$

a) Wenn $r \leq \frac{q-1}{q^2+q-1}$ gilt, dann ist $B(G_{n,k,b}) \sim c_1(\beta, k) n^k$.

b) Wenn $r > \frac{q-1}{q^2+q-1}$ gilt, dann ist $\max\{c_1(\beta, k), c_2(\beta, k) + \frac{1}{q^{k-1}} c_3(\beta, k)\} n^k \lesssim B(G_{n,k,b}) \lesssim (c_2(\beta, k) + c_3(\beta, k)) n^k$.

Teil b) enthält nur Schranken anstatt eines exakten asymptotischen Wertes. Die Schranken unterscheiden sich aber nicht so sehr voneinander, da

$$\frac{c_2(\beta, k)}{c_3(\beta, k)} = \left(\frac{\beta}{q\beta - qr} \right)^k \frac{q}{\beta} (k - (k-1)\beta) \geq \left(\frac{\beta}{q\beta - qr} \right)^k \frac{k(q-1) + 1}{\beta} \geq 6,$$

weil $\beta > q\beta - qr$ genau dann gilt, wenn $r > \frac{q-1}{q^2+q-1}$ und $k \geq 2, q \geq 2, \beta \leq \frac{1}{2}$ sind.

Sei $U = \{\beta \in (0, 0.5] : r > \frac{q-1}{q^2+q-1}\}$ die Menge der Zahlen β , auf die die Bedingung in Teil b) zutrifft und somit der exakte asymptotische Wert der Bandbreite unbekannt ist. Es gilt $r > \frac{q-1}{q^2+q-1}$ genau dann, wenn $\frac{1}{q+1} < \beta < \frac{q}{q^2+q-1}$ ist. Somit ist das Lebesgue-Maß von U gleich dem Grenzwert $\sum_{q=2}^{\infty} \left(\frac{q}{q^2+q-1} - \frac{1}{q+1} \right) \approx 0.119$. Für die Mehrheit der Zahlen $\beta \in (0, 0.5]$ ist die exakte asymptotische Bandbreite des zugehörigen Graphen also bekannt.

Als Motivation für die folgenden Definitionen betrachten wir zunächst, wie die einfache Palindromordnung aus Abbildung 3.3.1 im Setup des Einheitsquadrates schematisch aussieht, siehe Abbildung 3.4.1. Die Pfeile symbolisieren dabei die Ordnung.

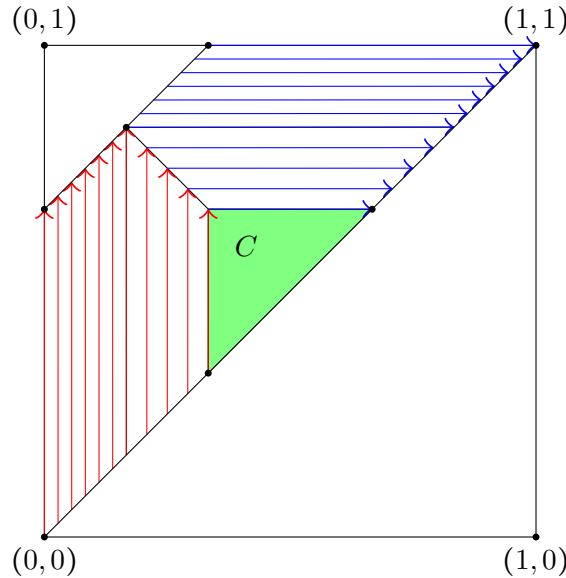


Abb. 3.4.1: Einfache Palindromordnung für $k = 2$ und $\beta = \frac{2}{3}$. Die Darstellung der Ordnung auf C wurde dabei bewusst weggelassen. Die Pfeile verlaufen dort parallel zu den roten Pfeilen.

Für $\beta < 0.5$ ist die Menge C jedoch leer, siehe Abbildung 3.4.2, und andere Zerlegungen der Knotenmenge sind sinnvoller.

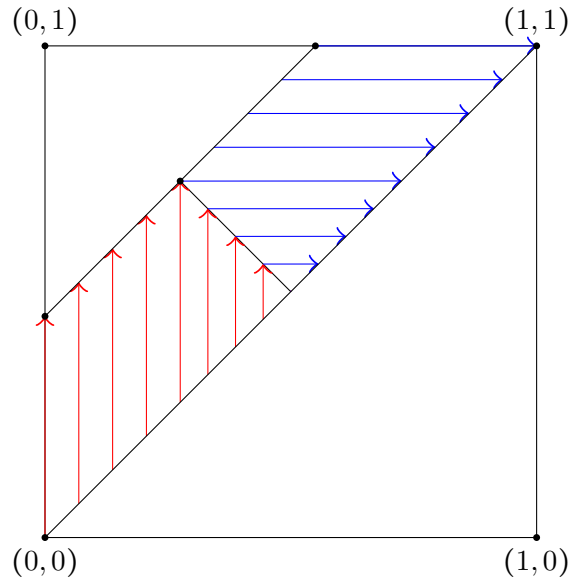


Abb. 3.4.2: Einfache Palindromordnung für $k = 2$ und $\beta = \frac{9}{20}$.

Sei also $b \sim \beta n$ mit $\beta \in (0, 0.5]$. Wie schon in Abschnitt 3.3 zerlegen wir die Knotenmenge in mehrere Teilmengen, die hier durch Polygone repräsentiert werden. Wir erinnern dazu an die Festlegungen $q \in \mathbb{N}$ und $r \in \mathbb{R}$, sodass $1 = q\beta + r$ gilt. Wir definieren nun in Ω mehrere Punktmengen.

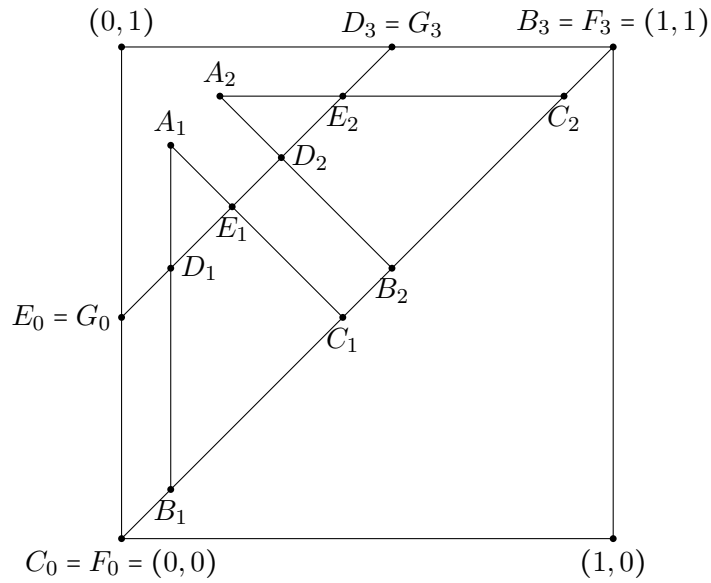


Abb. 3.4.3: Polygone und wichtige Punkte für $\beta = \frac{9}{20}$ (also Fall a) mit $q = 2$, $r = \frac{1}{10} < \frac{1}{5}$.

Zunächst seien für $i = 1, \dots, q$

$$\begin{aligned} A_i &= (ir, ir + q(\beta - r)), \\ B_i &= (r - \beta + i\beta, r - \beta + i\beta), \\ C_i &= (i\beta, i\beta). \end{aligned}$$

Im Folgenden bezeichnen wir Geraden, die durch $y = ax + b$ gegeben sind, (oder allgemeiner durch $ax + by = c$) mit $g_{y=ax+b}$ (oder $g_{ax+by=c}$). Wir stellen fest, dass die Punkte B_i und C_i auf $g_{y=x}$ liegen. Weiterhin liegen die Punkte A_i genau dann oberhalb oder auf der Geraden $g_{y=x+\beta}$, wenn $r \leq \frac{q-1}{q^2+q-1}$, wie leicht durch Auflösen der Gleichung $\beta = q(\beta - r)$ nach r und unter Berücksichtigung der Gleichung $q\beta + r = 1$ nachzurechnen ist. Dies ist der Grund für die Unterteilung in die Fälle a) und b) in Satz 3.4.1.

Für den Fall a), also für $r \leq \frac{q-1}{q^2+q-1}$ definieren wir die Punkte D_i und E_i als die Schnittpunkte der Strecken $\overline{A_i B_i}$ beziehungsweise $\overline{A_i C_i}$ mit der Geraden $g_{y=x+\beta}$. Mit

$$\gamma = \beta \left(1 - \frac{1}{q}\right)$$

ergeben sich für $i = 1, \dots, q$ die Koordinaten

$$\begin{aligned} D_i &= (r + (i-1)\gamma, r + (i-1)\gamma + \beta), \\ E_i &= (i\gamma, i\gamma + \beta). \end{aligned}$$

Für den Fall b), also für $r > \frac{q-1}{q^2+q-1}$, definieren wir die Punkte F_i als diejenigen Punkte, die die Strecke zwischen $(0, 0)$ und $(1, 1)$ in $q+1$ gleichgroße Teile aufteilen. Die Punkte G_i seien die Schnittpunkte der Strecken zwischen F_i und $(0, 1)$ mit der Geraden $g_{y=x+\beta}$. Damit ergeben sich die konkreten Koordinaten für $i = 0, \dots, q+1$:

$$\begin{aligned} F_i &= \left(\frac{i}{q+1}, \frac{i}{q+1}\right), \\ G_i &= \left(\frac{i(1-\beta)}{q+1}, \frac{i(1-\beta)}{q+1} + \beta\right). \end{aligned}$$

Wie im Fall a) sei E_q der Schnittpunkt der Geraden $g_{y=x+\beta}$ und $g_{y=q\beta}$. Schließlich definieren wir noch einen Hilfspunkt $H_1 = (r, \beta)$. Für den Fall a) nutzen wir außerdem die Punkte $C_0 = F_0 = (0, 0)$, $B_{q+1} = F_{q+1} = (1, 1)$, $E_0 = G_0 = (0, \beta)$ und $D_{q+1} = G_{q+1} = (1 - \beta, 1)$.

In den Abbildungen 3.4.3 und 3.4.4 sind diese Punkte für $\beta = \frac{9}{20}$ (also Fall a) mit $q = 2, r = \frac{1}{10} < \frac{1}{5}$) und $\beta = \frac{7}{20}$ (also Fall b) mit $q = 2, r = \frac{3}{10} > \frac{1}{5}$) dargestellt.

Wegen $\overrightarrow{F_i A_i} = \left(\frac{1-r(q+1)}{\beta}\right) \overrightarrow{F_i G_i}$ liegen die Punkte A_i auf der Geraden durch F_i und G_i . Weiterhin liegen die Punkte $F_0, B_1, F_1, C_1, \dots, B_q, F_q, C_q, F_{q+1}$ in dieser Reihenfolge auf der Geraden $g_{y=x}$. Zudem liegt H_1 auf der Strecke $\overline{A_1 B_1}$. Das folgende Lemma ist ein wichtiges Werkzeug zur Berechnung der Maße der betrachteten Polygone. Das betrachtete Integrationsgebiet wird in Abbildung 3.4.5 veranschaulicht.

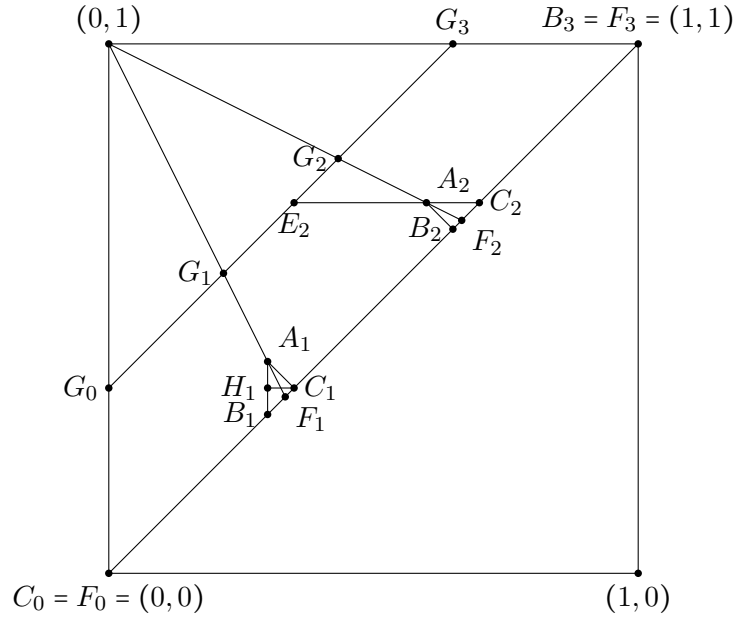


Abb. 3.4.4: Polygone und wichtige Punkte für $\beta = \frac{7}{20}$ (also Fall b) mit $q = 2$, $r = \frac{3}{10} > \frac{1}{5}$.

Lemma 3.4.3. Seien $0 \leq s < t \leq 1$ sowie $P_1 = (\xi_1, \xi_1 + s)$, $P_2 = (\xi_2, \xi_2 + s)$ Punkte auf der Geraden $g_{y=x+s}$ mit $0 \leq \xi_1 \leq \xi_2 \leq 1 - s$ und seien $P_3 = (\xi_3, \xi_3 + t)$, $P_4 = (\xi_4, \xi_4 + t)$ Punkte auf der Geraden $g_{y=x+t}$ mit $0 \leq \xi_3 \leq \xi_4 \leq 1 - t$. Seien weiter $u = \xi_2 - \xi_1$ und $v = \xi_4 - \xi_3$. Dann gilt

$$\mu(P_1 P_2 P_4 P_3) = \frac{1}{(k-2)!} \cdot \frac{1}{t-s} \left(\frac{1}{k} (v-u)(t^k - s^k) + \frac{tu-sv}{k-1} (t^{k-1} - s^{k-1}) \right).$$

Beweis. Sei $P = P_1 P_2 P_3 P_4$. Dann ist nach (3.15)

$$\mu(P) = \frac{1}{(k-2)!} \iint_P (y-x)^{k-2} dx dy.$$

Wir nutzen nun die Koordinatentransformation $x' = x + y$, $y' = y - x$. Die Transformationsmatrix und ihre Inverse sind

$$T = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ und } T^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dabei ist $\det(T) = \frac{1}{2}$. Diese Koordinatentransformation führt auf ein Integrationsgebiet in Form eines Trapezes, dessen Grundseite parallel zur x' -Achse liegt. Mit

$$\begin{aligned} u &= \xi_2 - \xi_1, \\ v &= \xi_4 - \xi_3, \\ \eta_o &= \frac{2\xi_4 + t - 2\xi_2 - s}{t-s} (y' - s) + 2\xi_2 + s, \\ \eta_u &= \frac{2\xi_3 + t - 2\xi_1 - s}{t-s} (y' - s) + 2\xi_1 + s \end{aligned}$$

gilt

$$\begin{aligned}
 \mu(P) &= \frac{1}{(k-2)!} \iint_P (y-x)^{k-2} dx dy \\
 &= \frac{1}{(k-2)!} \cdot \det(T) \int_s^t \int_{\eta_u}^{\eta_o} (y')^{k-2} dx' dy' \\
 &= \frac{1}{(k-2)!} \cdot \frac{1}{2} \int_s^t \left(2u + \frac{2v-2u}{t-s} (y' - s) \right) (y')^{k-2} dy' \\
 &= \frac{1}{(k-2)!} \cdot \frac{1}{t-s} \left(\int_s^t (tu - sv) (y')^{k-2} dy' + \int_s^t (v-u) (y')^{k-1} dy' \right) \\
 &= \frac{1}{(k-2)!} \cdot \frac{1}{t-s} \left(\frac{1}{k} (v-u) (t^k - s^k) + \frac{tu - sv}{k-1} (t^{k-1} - s^{k-1}) \right).
 \end{aligned}$$

□

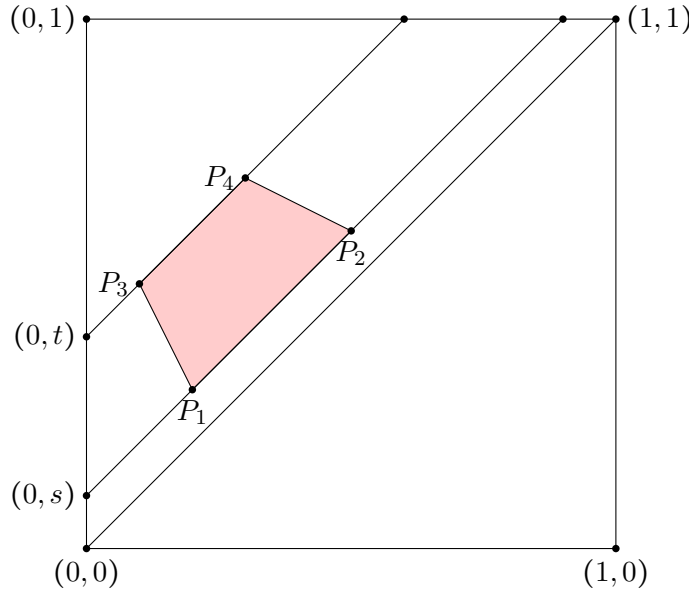


Abb. 3.4.5: Illustration eines Beispiel-Integrationsgebiets aus Lemma 3.4.3 mit $s = 0.1$ und $t = 0.4$.

Da nur die Differenz der ξ -Werte einen Einfluss hat, ergibt sich:

Korollar 3.4.2. Seien $0 \leq s < t \leq 1$ und seien P_1, P_2 sowie Q_1, Q_2 Punkte aus Ω auf der Geraden $g_{y=x+s}$ mit $\overrightarrow{P_1 P_2} = \overrightarrow{Q_1 Q_2}$ nach Nordosten zeigend. Weiter seien P_3, P_4 und Q_3, Q_4 Punkte auf der Geraden $g_{y=x+t}$ mit $\overrightarrow{P_3 P_4} = \overrightarrow{Q_3 Q_4}$ ebenfalls nach Nordosten zeigend. Dann gilt

$$\mu(P_1 P_2 P_4 P_3) = \mu(Q_1 Q_2 Q_4 Q_3).$$

Durch Einsetzen der entsprechenden Werte und Nutzen der Definition der c -Funktionen in Satz 3.4.1 erhalten wir die Maße von einigen im Folgenden hilfreichen Polygone zusammengefasst in folgendem Korollar:

Korollar 3.4.3. *Es gilt für alle möglichen i :*

$$\begin{aligned}
 \mu(F_0 F_{q+1} G_{q+1} G_0) &= \frac{\beta^{k-1}}{k!} (k - (k-1)\beta) = (q+1)c_2(\beta, k), \\
 \mu(C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i) &= \frac{\beta^{k-1}}{(k-1)!} r = (q+1)c_2(\beta, k) - qc_1(\beta, k), \\
 \mu(B_i C_i E_i D_i) &= \frac{\beta^{k-1}}{k!} \left(k(\beta - r) - \frac{\beta(k-1)}{q} \right) \\
 &= (q+1)(c_1(\beta, k) - c_2(\beta, k)), \\
 \mu(F_i F_{i+1} G_{i+1} G_i) &= \frac{1}{q+1} \mu(F_0 F_{q+1} G_{q+1} G_0) = c_2(\beta, k), \\
 \mu(A_i B_i C_i) &= \frac{(\beta - r)^k}{k!} q^{k-1} = (q+1)c_3(\beta, k), \\
 \mu(A_i B_i F_i) &= \left(1 - \frac{i}{q+1}\right) \mu(A_i B_i C_i) = (q+1-i)c_3(\beta, k), \\
 \mu(A_i F_i C_i) &= \frac{i}{q+1} \mu(A_i B_i C_i) = ic_3(\beta, k), \\
 \mu(B_1 C_1 H_1) &= \frac{1}{q^{k-1}} \mu(A_1 B_1 C_1) = \frac{q+1}{q^{k-1}} c_3(\beta, k).
 \end{aligned}$$

Beweis. Der Beweis ergibt sich durch Anwendung von Lemma 3.4.3 auf die jeweiligen Polygone. \square

Zum Ende dieses Abschnitts zeigen wir in Vorbereitung auf den nächsten Abschnitt folgendes Lemma:

Lemma 3.4.4. *Sei $b = \lfloor \beta n \rfloor$. Dann gilt $V_{n,k,b} = V_{n,k}(F_0 F_{q+1} G_{q+1} G_0)$.*

Beweis. Es ist $F_0 F_{q+1} G_{q+1} G_0 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq x \leq y \leq 1, y - x \leq \beta\}$. Die folgende Kette von Äquivalenzen zeigt für Mengen $X \in \binom{[0,n]}{k}$ die Behauptung:

$$\begin{aligned}
 X \in V_{n,k,b} &\iff \overline{X} - \underline{X} \leq b \iff \frac{1}{n} \overline{X} - \frac{1}{n} \underline{X} \leq \beta \\
 &\iff \frac{1}{n} (\underline{X}, \overline{X}) \in F_0 F_{q+1} G_{q+1} G_0 \iff X \in V_{n,k}(F_0 F_{q+1} G_{q+1} G_0).
 \end{aligned}$$

Dabei ist zu beachten, dass wegen $\beta n - 1 < b \leq \beta n$ die Äquivalenz $(\overline{X} - \underline{X} \leq b) \iff (\frac{1}{n} \overline{X} - \frac{1}{n} \underline{X} \leq \beta)$ gilt. \square

Der nächste Abschnitt liefert einen Beweis für die oberen Schranken von Satz 3.4.1.

3.4.2 Obere Schranken für die Bandbreite

Im Folgenden stellen wir zwei Nummerierungen f von $G_{n,k,b}$ vor, deren Bandbreite asymptotisch äquivalent zu den behaupteten oberen Schranken in Satz 3.4.1 sind.

Dabei betrachten wir zunächst nur den Fall, dass $b = \lfloor \beta n \rfloor$ ist, da dann nach Lemma 3.4.4 die Knotenmenge $V_{n,k,b}$ bestmöglich in das Polygon $F_0 F_{q+1} G_{q+1} G_0$ hineinprojiziert wird. Mithilfe dieses Spezialfalls werden wir dann später unter Anwendung von Lemma 3.1.1 und Grenzwertbetrachtungen die oberen Schranken für den allgemeinen Fall $b \sim \beta n$ zeigen. Wie in Abschnitt 3.3 definieren wir eine Totalordnung $V_{n,k,b} = S_1 \oplus \dots \oplus S_l$, die aus Teilordnungen auf verschiedenen Polygonen zusammengesetzt ist. Um Überschneidungen auf den Rändern der Polygone zu vermeiden, beschreiben wir explizit, welcher Teil des Randes im jeweiligen Fall gelöscht wird, obwohl die Ordnung durchaus auf dem gesamten Polygon definiert werden kann. Beispielsweise bedeutet eine Notation der Form $C_0 B_1 D_1 E_0 \setminus \overline{B_1 D_1}$, dass die Strecke $\overline{B_1 D_1}$ aus dem abgeschlossenen Viereck $C_0 B_1 D_1 E_0$ gelöscht wird.

Fall a) $r \leq \frac{q-1}{q^2+q+1}$.

Wir definieren die Totalordnung \leq wie folgt:

$$\begin{aligned} V_{n,k,b} = & V_{n,k}(C_0 B_1 D_1 E_0 \setminus \overline{B_1 D_1}) \oplus V_{n,k}(B_1 C_1 E_1 D_1 \setminus \overline{C_1 E_1}) \\ & \oplus V_{n,k}(C_1 B_2 D_2 E_1 \setminus \overline{B_2 D_2}) \oplus \dots \oplus V_{n,k}(B_q C_q E_q D_q \setminus \overline{C_q E_q}) \oplus V_{n,k}(C_q B_{q+1} D_{q+1} E_q). \end{aligned}$$

Damit müssen wir noch die Teilordnungen auf $V_{n,k}(C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i)$, $i = 0, \dots, q$, und auf $V_{n,k}(B_i C_i E_i D_i)$, $i = 1, \dots, q$ definieren.

Dabei erlauben wir bei $V_{n,k}(C_q B_{q+1} D_{q+1} E_q)$ auch den kompletten Rand.

Falls $(\underline{X}, \overline{X}) = (\underline{Y}, \overline{Y})$ und $X \leq_{lex} Y$ gelten, setzen wir in beiden Fällen $X \leq_i Y$. Sei also $(\underline{X}, \overline{X}) \neq (\underline{Y}, \overline{Y})$.

Als erstes betrachten wir $V_{n,k}(C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i)$. Hierfür nutzen wir ein neues Koordinatensystem mit Ursprung C_i . Die dazugehörige Transformationsmatrix und ihre Inverse sind

$$M_i = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{i}{q} \\ 1 & 1 - \frac{i}{q} \end{pmatrix} \text{ und } M_i^{-1} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{i}{q} & \frac{i}{q} \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die neuen Koordinatenachsen zeigen somit in Richtung $\overrightarrow{C_i B_{i+1}}$ und $\overrightarrow{C_i E_i}$. Die Ordnung ist die lexikographische Ordnung der Punkte $\frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X})$ bezüglich des neuen Koordinatensystems. Das heißt für $X, Y \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i)$ und $(\underline{X}, \overline{X}) \neq (\underline{Y}, \overline{Y})$ setzen wir $X \leq_i Y$, falls

$$\left(\left(1 - \frac{i}{q} \right) \underline{X} + \frac{i}{q} \overline{X} - i\beta, -\underline{X} + \overline{X} - i\beta \right) \leq_{lex} \left(\left(1 - \frac{i}{q} \right) \underline{Y} + \frac{i}{q} \overline{Y} - i\beta, -\underline{Y} + \overline{Y} - i\beta \right),$$

siehe Abbildung 3.4.6.

Nun betrachten wir $V_{n,k}(B_i C_i E_i D_i)$. Hier arbeiten wir mit Polarkoordinaten im Koordinatensystem mit Ursprung A_i und x -Achse in Richtung $\overrightarrow{A_i B_i}$.

Für $X \in V_{n,k}(B_i C_i E_i D_i)$ seien $\varphi_i(X)$ und $r_i(X)$ die Winkel- und Radiuskoordinaten von $\frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X})$ in diesem Koordinatensystem. Die Ordnung ist dann die lexikographische Ordnung bezüglich der gespiegelten Polarkoordinaten. Das bedeutet, wir

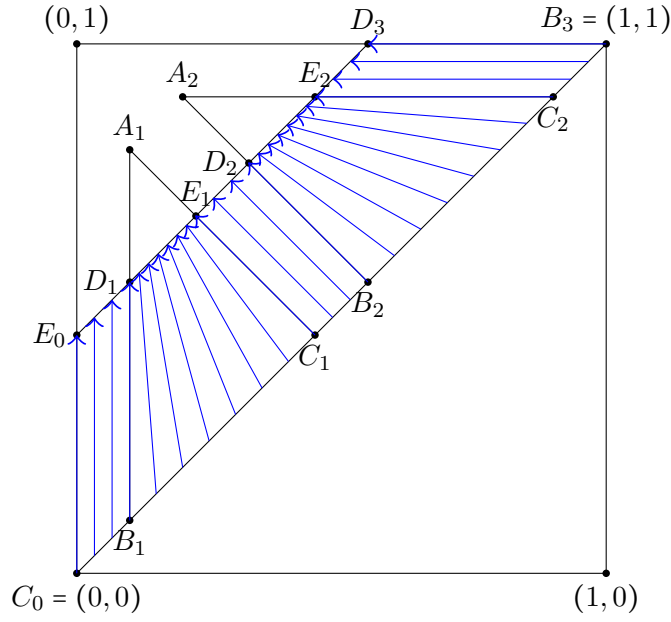


Abb. 3.4.6: Schematische Illustration der Ordnung für Fall a).

setzen für $X, Y \in V_{n,k}(B_i C_i E_i D_i)$ und $(\underline{X}, \overline{X}) \neq (\underline{Y}, \overline{Y})$

$$X \leq_i Y, \text{ falls } (\varphi_i(X), -r_i(X)) \leq_{lex} (\varphi_i(Y), -r_i(Y)),$$

siehe Abbildung 3.4.6. Falls $r = \frac{q-1}{q^2+q+1}$ gilt, so ist $A_i = D_i = E_i$. In diesem Fall könnte einem Knoten $X \in V_{n,k,b}$ mit $\frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X}) = A_i$ kein Winkel zugeordnet werden. Für solch einen Knoten gelte $X \geq_i Y$ für alle $Y \in V_{n,k}(B_i C_i E_i D_i)$, um mit der Ordnung auf $V_{n,k}(C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i)$ konsistent zu bleiben.

Lemma 3.4.5. Sei mit \leq_a die Ordnung für Fall a) bezeichnet. Dann gilt für alle $X, Y \in V_{n,k,b}$

$$X \leq_a Y \Rightarrow \underline{X} \leq \overline{Y}. \quad (3.16)$$

Beweis. Um dies zu begründen, betrachten wir mehrere Fälle. Wir definieren zunächst für $X \in V_{n,k,b}$

$$P_{\underline{X}} = \frac{1}{n}(\underline{X}, \underline{X}) \text{ und } P_{\overline{X}} = \frac{1}{n}(\overline{X}, \overline{X}). \quad (3.17)$$

Fall 1. $X, Y \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i)$.

Angenommen $\overline{Y} < \underline{X}$. Dann gilt wegen $\underline{Y} < \overline{Y} < \underline{X} < \overline{X}$, dass $\left(1 - \frac{i}{q}\right)\underline{Y} + \frac{i}{q}\overline{Y} - i\beta < \left(1 - \frac{i}{q}\right)\underline{X} + \frac{i}{q}\overline{X} - i\beta$, also $Y <_a X$, was einen Widerspruch darstellt.

Fall 2. $X, Y \in V_{n,k}(B_i C_i E_i D_i)$.

Wir bemerken zunächst, dass die Begrenzungsvektoren $\overrightarrow{A_i B_i}$ und $\overrightarrow{A_i C_i}$ des Polygons mit dem Einheitsvektor der negativen y -Achse e_{-y} jeweils einen Winkel aus $[0^\circ, 90^\circ]$ einschließen. Demzufolge schließen auch die Vektoren $\overrightarrow{A_i X}$ und $\overrightarrow{A_i Y}$ mit e_{-y} einen

Winkel $\alpha = \angle(e_{-y}, \overrightarrow{A_i X}) \in [0^\circ, 90^\circ]$ beziehungsweise $\beta = \angle(e_{-y}, \overrightarrow{A_i Y}) \in [0^\circ, 90^\circ]$ ein. Nun betrachten wir die Punkte P_X und P_Y . Da $\overrightarrow{X P_X}$ in Richtung der negativen y -Achse zeigt, gilt $\alpha' = \angle(e_{-y}, \overrightarrow{A_i P_X}) \leq \alpha$. Da außerdem $\overrightarrow{Y P_Y}$ in Richtung der positiven x -Achse zeigt, gilt $\beta' = \angle(e_{-y}, \overrightarrow{A_i P_Y}) \geq \beta$. Angenommen $\overline{Y} < \underline{X}$. Dann gilt $\beta' < \alpha'$ und somit $\beta \leq \beta' < \alpha' \leq \alpha$. Da das betrachtete Koordinatensystem nur von A_i aus um einen festen Winkel gedreht ist, bleiben die Winkeldifferenzen und damit die Anordnung erhalten und es folgt

$$\varphi_i(Y) \leq \varphi_i(P_Y) < \varphi_i(P_X) \leq \varphi_i(X),$$

also $Y <_a X$, was einen Widerspruch darstellt.

Fall 3. X und Y liegen in zu verschiedenen Polygonen gehörenden Knotenmengen. Die Begrenzungsvektoren $\overrightarrow{A_i B_i}$ und $\overrightarrow{A_i C_i}$ der Polygone schließen mit dem Einheitsvektor der negativen y -Achse e_{-y} jeweils einen Winkel aus $[0^\circ, 90^\circ]$ ein. Damit ist B_i der Punkt mit der kleinsten y -Komponente und C_i der Punkt mit der größten x -Komponente aus dem Polygon $B_i C_i E_i D_i$. Außerdem ist C_i der Punkt mit der kleinsten y -Komponente und B_{i+1} der Punkt mit der größten x -Komponente aus dem Polygon $C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i$. Sei nun $X \leq_a Y$ mit $X \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i)$ und $Y \in V_{n,k}(B_j C_j E_j D_j)$ mit $j > i$. Seien zudem für $P \in \Omega$ mit x_P und y_P die x - beziehungsweise y -Komponente von P bezeichnet. Dann gilt $\frac{1}{n} \underline{X} \leq x_{B_{i+1}} = y_{B_{i+1}} \leq y_{B_j} \leq \frac{1}{n} \overline{Y}$. Analog folgt für $X \leq_a Y$ mit $X \in V_{n,k}(B_i C_i E_i D_i)$ und $Y \in V_{n,k}(C_j B_{j+1} D_{j+1} E_j)$ mit $j \geq i$, dass $\frac{1}{n} \underline{X} \leq x_{C_i} = y_{C_i} \leq y_{C_j} \leq \frac{1}{n} \overline{Y}$ gilt. Wegen $x_{B_i} = y_{B_i} \leq x_{C_i} = y_{C_i} \leq x_{B_{i+1}} = y_{B_{i+1}}$ gilt $\underline{X} \leq \overline{Y}$ auch für die Fälle $X \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i)$ und $Y \in V_{n,k}(C_j B_{j+1} D_{j+1} E_j)$ sowie $X \in V_{n,k}(B_i C_i E_i D_i)$ und $Y \in V_{n,k}(B_j C_j E_j D_j)$, jeweils mit $j > i$, woraus die Behauptung folgt. \square

Lemma 3.4.6. Sei f_a die Nummerierung für Fall a). Dann gilt mit $b = \lfloor \beta n \rfloor$ für $n \rightarrow \infty$:

$$B_{f_a}(G_{n,k,b}) \lesssim c_1(\beta, k) n^k.$$

Beweis. Sei $P = (\xi, \xi)$ ein beliebiger Punkt auf der Strecke $\overline{C_0 B_{q+1}}$, also $0 \leq \xi \leq 1$. Wir ordnen P den neuen Punkt \hat{P} wie folgt zu: Falls $P \in \overline{C_i B_{i+1}}$ für ein i gilt, dann sei \hat{P} der Schnittpunkt der Geraden $g_{y=x+\beta}$ mit der Geraden durch P die parallel zu $\overline{C_i E_i}$ verläuft. Falls $P \in \overline{B_i C_i}$ für ein i gilt, dann sei \hat{P} der Schnittpunkt der Geraden $g_{y=x+\beta}$ mit der Geraden durch P und A_i , siehe Abbildung 3.4.7.

Seien nun $X, Y \in V_{n,k,b}$ zwei benachbarte Knoten mit $X \leq_a Y$. Nach der Definition der Ordnung und wegen Lemma 3.4.5 gilt

$$f_a(Y) - f_a(X) \leq |V_{n,k}(P_X P_Y \hat{P}_Y \hat{P}_X)|.$$

Demzufolge müssen wir

$$|V_{n,k}(P_X P_Y \hat{P}_Y \hat{P}_X)| \lesssim c_1(\beta, k) n^k \quad (3.18)$$

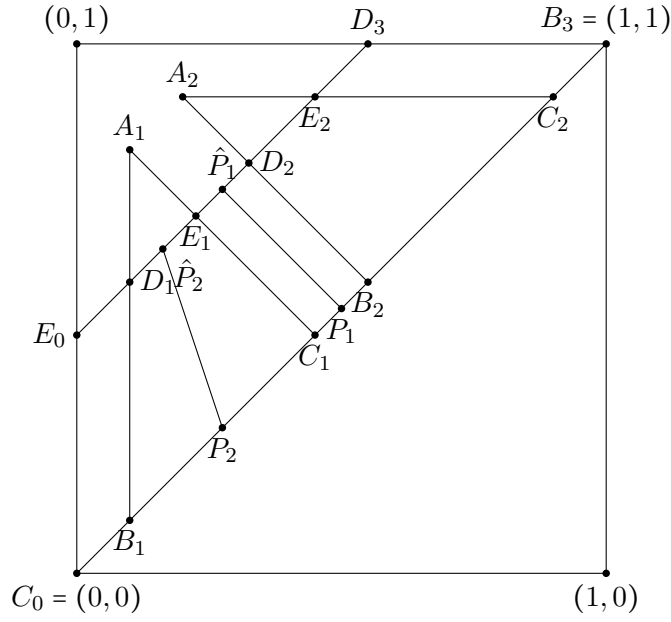


Abb. 3.4.7: Wichtige Punkte für die obere Schranke für Fall a).

zeigen.

Für das Folgende ist die einfache Tatsache

$$\overrightarrow{B_i B_{i+1}} = \overrightarrow{C_i C_{i+1}} = (\beta, \beta) \quad (3.19)$$

hilfreich. Da X und Y benachbart sind, erhalten wir mit Lemma 3.1.2, $\overline{Y} - \underline{X} \leq b \leq \beta n$. Dann gilt $\frac{1}{n}(\overline{Y} - \underline{X}) \leq \beta$. Sei

$$P' = \left(\frac{1}{n} \underline{X} + \beta, \frac{1}{n} \underline{X} + \beta \right). \quad (3.20)$$

Dann gilt

$$\mu(P_{\underline{X}} P_{\overline{Y}} \hat{P}_{\overline{Y}} \hat{P}_{\underline{X}}) \leq \mu(P_{\underline{X}} P' \hat{P}' \hat{P}_{\underline{X}}).$$

Aus den Korollaren 3.4.2 und 3.4.3 ergibt sich für alle möglichen i ,

$$\begin{aligned} \mu(P_{\underline{X}} P' \hat{P}' \hat{P}_{\underline{X}}) &= \mu(B_i B_{i+1} D_{i+1} D_i) = \mu(C_i C_{i+1} E_{i+1} E_i) \\ &= \mu(B_i C_i E_i D_i) + \mu(C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i) \\ &= c_1(\beta, k). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Eine Darstellung dieser Tatsache findet sich in den Abbildungen 3.4.8 und 3.4.9.

Mit Korollar 3.4.1 erhalten wir

$$|V_{n,k}(P_{\underline{X}} P_{\overline{Y}} \hat{P}_{\overline{Y}} \hat{P}_{\underline{X}})| \lesssim (c_1(\beta, k)) n^k,$$

womit (3.18) gezeigt ist. □

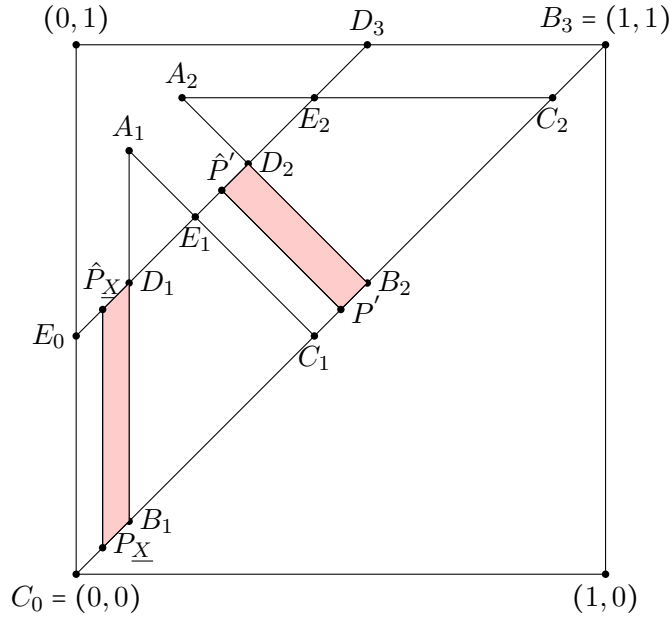


Abb. 3.4.8: Illustration von (3.21), wobei $P_X \in \overline{C_i B_{i+1}}$ für ein i gilt. Da die Polygone $P_X B_{i+1} D_{i+1} \hat{P}_X$ und $P' B_{i+2} D_{i+2} \hat{P}'$ Parallelogramme sind, gilt $\overrightarrow{\hat{P}_X D_{i+1}} = \overrightarrow{P_X B_{i+1}} = \overrightarrow{P' B_{i+2}} = \overrightarrow{\hat{P}' D_{i+2}}$. Beide roten Vierecke besitzen somit nach Korollar 3.4.2 das gleiche Maß.

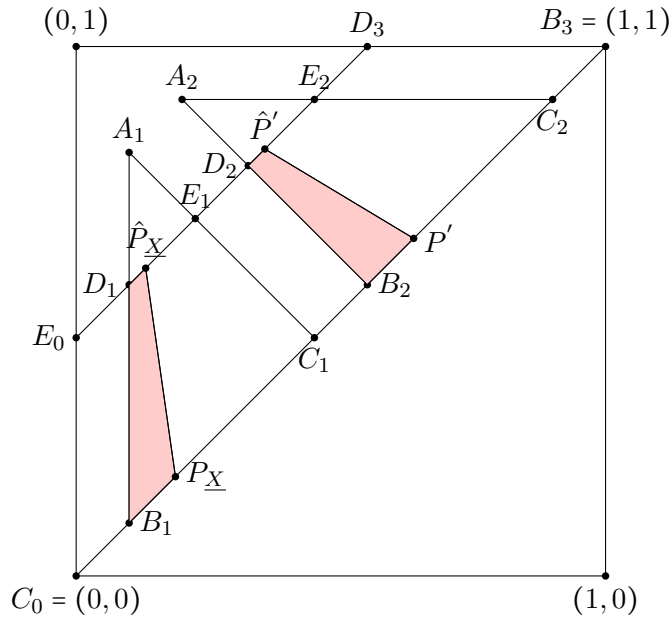


Abb. 3.4.9: Illustration von (3.21), wobei $P_X \in \overline{B_i C_i}$ für ein i gilt. Es gilt wegen $\overline{A_i C_i} = \overline{A_{i+1} B_{i+1}}$, $\overline{A_i E_i} = \overline{A_{i+1} D_{i+1}}$ und den Strahlensätzen $\frac{\overline{B_i P_X}}{\overline{D_i \hat{P}_X}} = \frac{\overline{A_i B_i}}{\overline{A_i D_i}} = \frac{\overline{A_i C_i}}{\overline{A_i E_i}} = \frac{\overline{A_{i+1} B_{i+1}}}{\overline{A_{i+1} D_{i+1}}} = \frac{\overline{B_{i+1} P'}}{\overline{D_{i+1} \hat{P}'}}$. Wegen $\overrightarrow{B_i P_X} = \overrightarrow{B_{i+1} P'}$ gilt dann auch $\overrightarrow{D_i \hat{P}_X} = \overrightarrow{D_{i+1} \hat{P}'}$. Beide roten Vierecke besitzen somit nach Korollar 3.4.2 das gleiche Maß.

Um zu erkennen, dass diese Ordnung tatsächlich ein Fortschritt gegenüber der im letzten Abschnitt definierten einfachen Palindromordnung ist, betrachten wir folgendes Beispiel mit $k = 2$ und $\beta = \frac{9}{20}$, was $b < \frac{n+2-1}{2}$ für große n impliziert. Seien M_1 der Mittelpunkt der Strecke $\overline{C_0B_3}$ und M_2 der Mittelpunkt der Strecke $\overline{E_0D_3}$. Außerdem sei M_S der Schnittpunkt der Geraden durch M_1 und M_2 und der Geraden durch C_1 , die parallel zur y -Achse verläuft. Für die Nummerierung f_a aus Fall a) gilt nach (3.21) $B_{f_a}(G_{n,k,b}) \sim \mu(C_0C_1E_1E_0)n^2$, wohingegen für die Nummerierung bezüglich der einfachen Palindromordnung f_{spo} die Beziehung $B_{f_{spo}}(G_{n,k,b}) \gtrsim \mu(C_0C_1M_SM_2E_0)n^2$ gilt. Dies liegt daran, dass es benachbarte Knoten gibt, deren sie repräsentierende Punkte im Einheitsquadrat für $n \rightarrow \infty$ beliebig nahe an C_0 sowie an C_1 liegen und alle Knoten aus $V_{n,k}(C_0C_1M_SM_2E_0)$ mit Ausnahme derjenigen, die auf die Strecke C_1M_S projiziert werden, in der Ordnung zwischen diesen Punkten liegen. Wegen Korollar 3.4.1 ist dann die Mächtigkeit dieser Menge asymptotisch $\mu(C_0C_1M_SM_2E_0)n^2$, was somit eine asymptotische untere Schranke für die Bandbreite von f_{spo} darstellt. Siehe dazu auch die Abbildungen 3.4.2 und 3.4.10. Da $\mu(C_0C_1M_SM_2E_0) > \mu(C_0C_1E_1E_0)$ gilt, ist die Ordnung aus Fall a) asymptotisch besser.

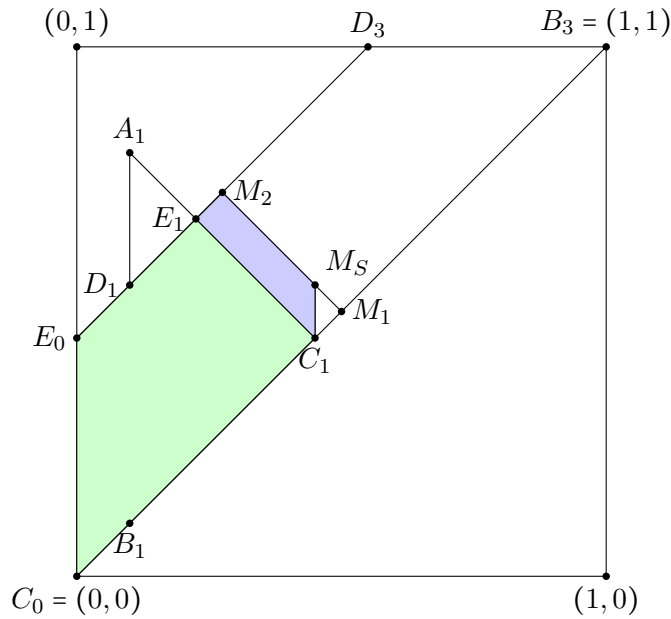


Abb. 3.4.10: Vergleich der Bandbreite der einfachen Palindromordnung mit der Ordnung aus Fall a) für $k = 2$ und $\beta = \frac{9}{20}$. Das Maß der grünen Fläche ist der asymptotische Vorfaktor der Bandbreite bezüglich der Nummerierung aus Fall a). Bei der Nummerierung bezüglich der einfachen Palindromordnung ist der Vorfaktor mindestens so groß wie die Summe der Maße der grünen und blauen Fläche.

Fall b) $r > \frac{q-1}{q^2+q+1}$. Auch hier betrachten wir zunächst nur den Fall, dass $b = \lfloor \beta n \rfloor$ ist. Wir nutzen eine ähnliche Ordnung wie in Fall a). Dabei betrachten wir

jedoch andere Polygone, da sich die Lage der sie definierenden Punkte wesentlich unterscheidet. Seien hierfür $A_0 = (0, q(\beta - r))$, $A_{q+1} = ((q+1)r, 1)$ und $I = (0, 1)$ als zusätzliche Punkte definiert. Damit liegen alle Punkte $A_i, i = 0, \dots, q+1$, auf der Geraden $g_{y=x+q(\beta-r)}$. Wir definieren die Totalordnung \leq wie folgt:

$$\begin{aligned} V_{n,k,b} = & V_{n,k}(C_0 B_1 A_1 G_1 G_0 A_0 \setminus (\overline{A_1 B_1} \cup \overline{A_1 G_1})) \oplus V_{n,k}(A_1 B_1 C_1 \setminus \overline{A_1 C_1}) \\ & \oplus V_{n,k}(C_1 B_2 A_2 G_2 G_1 A_1 \setminus (\overline{A_2 B_2} \cup \overline{A_2 G_2})) \oplus \dots \\ & \oplus V_{n,k}(C_{q-1} B_q A_q G_q G_{q-1} A_{q-1} \setminus (\overline{A_q B_q} \cup \overline{A_q G_q})) \\ & \oplus V_{n,k}(A_q B_q C_q \setminus \overline{A_q C_q}) \oplus V_{n,k}(C_q B_{q+1} A_{q+1} G_{q+1} G_q A_q). \end{aligned}$$

Damit müssen wir immer noch die Teilordnungen auf $V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} G_{i+1} G_i A_i)$, $i = 0, \dots, q$, und auf $V_{n,k}(A_i B_i C_i)$, $i = 1, \dots, q$, definieren. Hierbei erlauben wir auch wieder den kompletten Rand der Polygone.

Falls $(\underline{X}, \overline{X}) = (\underline{Y}, \overline{Y})$ und $X \leq_{lex} Y$ gilt, so setzen wir in allen Fällen $X \leq_i Y$. Nun sei $(\underline{X}, \overline{X}) \neq (\underline{Y}, \overline{Y})$.

Zunächst diskutieren wir $V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} G_{i+1} G_i A_i)$ in 3 Schritten. Als erstes teilen wir das Sechseck $C_i B_{i+1} A_{i+1} G_{i+1} G_i A_i$ in die zwei Vierecke $C_i B_{i+1} A_{i+1} A_i$ und $A_i A_{i+1} G_{i+1} G_i$. Dann definieren die zugehörigen Ordnungen auf beiden Vierecken und schließlich erklären wir, wie diese kombiniert werden.

Die Definition der Ordnung auf $V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} A_i)$ ist ähnlich der Ordnung auf $V_{n,k}(C_i B_{i+1} D_{i+1} E_i)$ aus Fall a). Das heißt, für $X, Y \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} A_i)$ und $(\underline{X}, \overline{X}) \neq (\underline{Y}, \overline{Y})$ setzen wir $X \leq_i Y$, falls

$$\left(\left(1 - \frac{i}{q} \right) \underline{X} + \frac{i}{q} \overline{X} - i\beta, -\underline{X} + \overline{X} - i\beta \right) \leq_{lex} \left(\left(1 - \frac{i}{q} \right) \underline{Y} + \frac{i}{q} \overline{Y} - i\beta, -\underline{Y} + \overline{Y} - i\beta \right).$$

Auf $V_{n,k}(A_i A_{i+1} G_{i+1} G_i)$ arbeiten wir mit Polarkoordinaten $\varphi_i(X)$ und $r_i(X)$ der Punkte $\frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X})$, mit $X \in V_{n,k}(A_i A_{i+1} G_{i+1} G_i)$. Das verwendete Koordinatensystem hat dabei den Ursprung I und die x -Achse in Richtung $\overrightarrow{IA_i}$ mit beliebiger, aber fester Einheitenlänge. Ähnlich zu der Ordnung auf $V_{n,k}(B_i C_i E_i D_i)$ aus Fall a) nutzen wir als Ordnung eine lexikographische Ordnung bezüglich der gespiegelten Polarkoordinaten, also für $X, Y \in V_{n,k}(A_i A_{i+1} G_{i+1} G_i)$ und $(\underline{X}, \overline{X}) \neq (\underline{Y}, \overline{Y})$ setzen wir

$$X \leq_i Y, \text{ falls } (\varphi_i(X), -r_i(X)) \leq_{lex} (\varphi_i(Y), -r_i(Y)).$$

Für einen Punkt $P \in C_i B_{i+1} A_{i+1} A_i$ sei \tilde{P} der Schnittpunkt der Geraden $g_{y=x+q(\beta-r)}$ mit der Geraden durch P , die parallel zu $\overline{C_i A_i}$ verläuft. Im Spezialfall $P = \frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X})$ mit $X \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} A_i)$ sei $\tilde{\varphi}(X)$ die Winkelkoordinate von \tilde{P} im Koordinatensystem, das auf $V_{n,k}(A_i A_{i+1} G_{i+1} G_i)$ eingeführt wurde.

Die beiden Ordnungen werden nun wie folgt zusammengesetzt:

Seien $X \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} A_i)$, $Y \in V_{n,k}(A_i A_{i+1} G_{i+1} G_i)$ und $(\underline{X}, \overline{X}) \neq (\underline{Y}, \overline{Y})$. Dann setzen wir

$$X \leq_i Y \text{ falls } \tilde{\varphi}_i(X) \leq \varphi_i(Y).$$

Schließlich behandeln wir $V_{n,k}(A_i B_i C_i)$. Die Ordnung ist hier die lexikographische Ordnung der gespiegelten Polarkoordinaten im Koordinatensystem mit Ursprung A_i und x -Achse in Richtung $\overrightarrow{A_i B_i}$. Die Längeneinheit ist dabei beliebig, aber fest.

Die gesamte Ordnung ist schematisch in Abbildung 3.4.11 dargestellt.

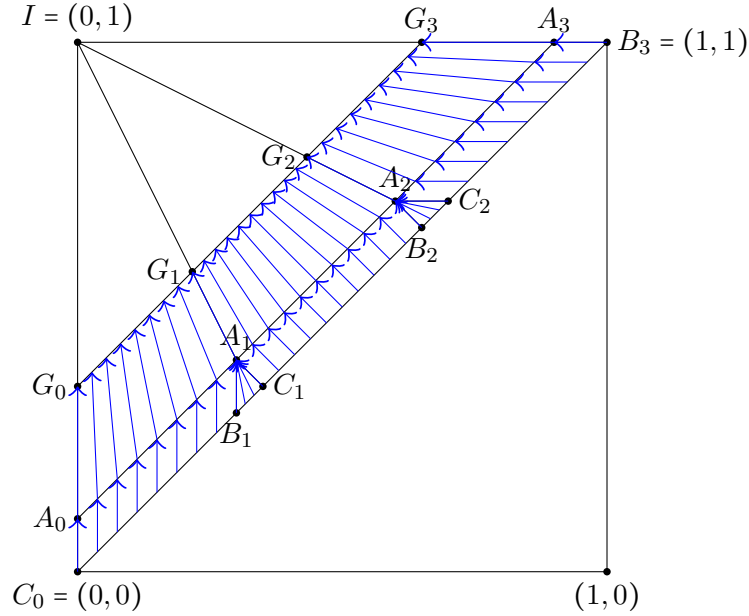


Abb. 3.4.11: Schematische Illustration der Ordnung für Fall b).

Lemma 3.4.7. Sei mit \leq_b die Ordnung für Fall b) bezeichnet. Dann gilt für alle $X, Y \in V_{n,k,b}$

$$X \leq_b Y \Rightarrow \underline{X} \leq \overline{Y}. \quad (3.22)$$

Beweis. Um dies zu begründen, betrachten wir mehrere Fälle. Wir erinnern zunächst an die Definition

$$P_{\underline{X}} = \frac{1}{n}(\underline{X}, \underline{X}) \text{ und } P_{\overline{X}} = \frac{1}{n}(\overline{X}, \overline{X}) \quad (3.23)$$

für $X \in V_{n,k,b}$. Da die einzelnen Teilordnungen denen aus Fall a) entsprechen, werden wir an einigen Stellen auf Lemma 3.4.5 verweisen.

Fall 1. $X, Y \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} A_i)$.

Dieser Fall verläuft analog zum Fall 1 von Lemma 3.4.5, da die verwendeten Ordnungen gleich sind.

Fall 2. $X, Y \in V_{n,k}(A_i A_{i+1} G_{i+1} G_i)$.

Dieser Fall verläuft analog zum Fall 2 von Lemma 3.4.5, da die verwendeten Ordnungen gleich sind. Hierbei ist zu beachten, dass der Punkt $I = (0,1)$ die Rolle von A_i einnimmt.

Fall 3. $X, Y \in V_{n,k}(A_i B_i C_i)$.

Dieser Fall verluft analog zum Spezialfall von Fall 2 von Lemma 3.4.5, bei dem die A_i auf der Geraden $g_{y=x+\beta}$ liegen.

Fall 4. $X \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} A_i)$ und $Y \in V_{n,k}(A_i A_{i+1} G_{i+1} G_i)$.

Wegen $X \leq_b Y$ gilt $\tilde{\varphi}_i(X) \leq \varphi_i(Y)$, also $\varphi_i(\tilde{P}_X) \leq \varphi_i(Y)$, wobei \tilde{P}_X der Schnittpunkt der Geraden $g_{y=x+q(\beta-r)}$ mit der Geraden durch $P_X = \frac{1}{n}(X, \overline{X})$, die parallel zu $\overline{C_i A_i}$ verluft, ist. Seien wieder fur $P \in \Omega$ die x - und y -Komponente von P mit x_P beziehungsweise y_P bezeichnet. Da $\overline{C_i A_i}$ mit der negativen y -Achse einen Winkel einschliet, der hochstens 90° betragt, gilt $y_{P_X} \leq y_{\tilde{P}_X}$. Weiter gilt $y_{\tilde{P}_X} \leq y_{P_Y}$ wegen $\varphi_i(\tilde{P}_X) \leq \varphi_i(Y)$ und da fur jeden Punkt P aus Ω gilt, dass \overrightarrow{IP} mit der negativen y -Achse einen Winkel einschliet, der hochstens 90° betragt. Mit $x_{P_X} \leq y_{P_X}$ folgt schlielich

$$\underline{P}_X = nx_{P_X} \leq ny_{P_X} \leq ny_{\tilde{P}_X} \leq ny_{P_Y} = \overline{Y}.$$

Fall 5. $X \in V_{n,k}(A_i A_{i+1} G_{i+1} G_i)$ und $Y \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} A_i)$.

Seien P_X, P_Y und \tilde{P}_Y analog zu Fall 4 definiert. Wegen $X \leq_b Y$ gilt $\tilde{\varphi}_i(Y) > \varphi_i(X)$, also $\varphi_i(\tilde{P}_Y) > \varphi_i(X)$. Da $\overline{C_i A_i}$ mit der negativen y -Achse einen Winkel einschliet, der mindestens 0° betragt, gilt $x_{P_Y} \geq x_{\tilde{P}_Y}$. Weiter gilt $x_{\tilde{P}_Y} \geq x_{P_X}$ wegen $\tilde{\varphi}_i(Y) > \varphi_i(X)$ und da fur jeden Punkt P aus Ω gilt, dass \overrightarrow{IP} mit der negativen y -Achse einen Winkel einschliet, der mindestens 0° betragt. Mit $y_{P_Y} \geq x_{P_Y}$ folgt schlielich

$$\underline{P}_X = nx_{P_X} \leq nx_{\tilde{P}_Y} \leq nx_{P_Y} \leq ny_{P_Y} = \overline{Y}.$$

Die restlichen Falle:

- $X \in V_{n,k}(A_i B_i C_i)$ und $Y \in V_{n,k}(A_j B_j C_j)$ mit $j > i$,
- $X \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} G_{i+1} G_i A_i)$ und $Y \in V_{n,k}(C_j B_{j+1} A_{j+1} G_{j+1} G_j A_j)$ mit $j > i$,
- $X \in V_{n,k}(A_i B_i C_i)$ und $Y \in V_{n,k}(C_j B_{j+1} A_{j+1} G_{j+1} G_j A_j)$ mit $j \geq i$,
- $X \in V_{n,k}(C_i B_{i+1} A_{i+1} G_{i+1} G_i A_i)$ und $Y \in V_{n,k}(A_j B_j C_j)$ mit $j > i$

laufen schlielich analog zu den Betrachtungen in Fall 3 von Lemma 3.4.5 ab. \square

Lemma 3.4.8. Sei f_b die Nummerierung fur den Fall b). Dann gilt mit $b = \lfloor \beta n \rfloor$ fur $n \rightarrow \infty$

$$B_{f_b}(G_{n,k,b}) \lesssim (c_2(\beta, k) + c_3(\beta, k))n^k.$$

Beweis. Sei $P = (\xi, \xi)$ ein beliebiger Punkt auf der Strecke $\overline{C_0 B_{q+1}}$, also $0 \leq \xi \leq 1$. Einem gegebenen P ordnen wir einen neuen Punkt \hat{P} wie folgt zu: Falls $P \in \overline{C_i B_{i+1}}$ fur ein i ist, also P zu dem Viereck $C_i B_{i+1} A_{i+1} A_i$ gehort, dann haben wir bereits den Punkt \tilde{P} definiert. Der Punkt \hat{P} ist nun der Schnittpunkt der Geraden $g_{y=x+\beta}$ mit der

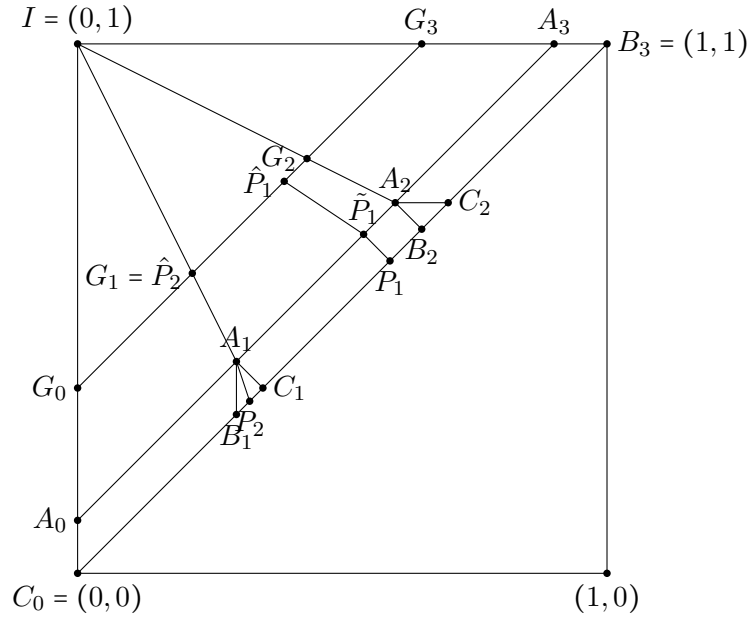


Abb. 3.4.12: Wichtige Punkte für die obere Schranke für Fall b).

Geraden durch \tilde{P} und I . Falls $P \in \overline{B_i C_i}$ für ein i ist, dann sei \hat{P} der Schnittpunkt der Geraden $g_{y=x+\beta}$ mit der Geraden durch I und A_i , siehe Abbildung 3.4.12.

Für $X \in V_{n,k,b}$ definieren wir P_X und $P_{\tilde{X}}$ wie in (3.17) und ähnlich zu Fall a) müssen wir beweisen, dass für $n \rightarrow \infty$

$$|V_{n,k}(P_X P_{\tilde{Y}} \tilde{P}_{\tilde{Y}} \hat{P}_{\tilde{Y}} \hat{P}_X \tilde{P}_X)| \lesssim (c_2(\beta, k) + c_3(\beta, k))n^k \quad (3.24)$$

gilt. Wir definieren P' wie in (3.20). Seien nun $X, Y \in V_{n,k,b}$ zwei benachbarte Knoten mit $X \leq_b Y$. Nach der Definition der Ordnung und wegen Lemma 3.4.7 gilt

$$f_b(Y) - f_b(X) \leq |V_{n,k}(P_X P' \tilde{P}' \hat{P}' \hat{P}_X \tilde{P}_X)|.$$

Demzufolge ist analog zu Fall a)

$$\mu(P_X P' \tilde{P}' \hat{P}' \hat{P}_X \tilde{P}_X) = c_2(\beta, k) + c_3(\beta, k)$$

zu zeigen. Aus den Korollaren 3.4.2 und 3.4.3 folgt für alle i

$$\begin{aligned} \mu(P_X P' \tilde{P}' \hat{P}' \hat{P}_X \tilde{P}_X) &= \mu(B_i B_{i+1} A_{i+1} G_{i+1} G_i A_i) = \mu(C_i C_{i+1} A_{i+1} G_{i+1} G_i A_i) \\ &= \mu(F_i F_{i+1} G_{i+1} G_i) + \mu(A_{i+1} F_{i+1} C_{i+1}) - \mu(A_i F_i C_i) \\ &= c_2(\beta, k) + c_3(\beta, k). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Dabei ist zu beachten, dass wir Korollar 3.4.2 zweimal anwenden müssen, nämlich auf das Polygon $P_X P' \tilde{P}' \hat{P}' \hat{P}_X \tilde{P}_X$ und auf das Polygon $\tilde{P}_X \tilde{P}' \hat{P}' \hat{P}_X$. Wegen

$$\begin{aligned} \mu(P_X P' \tilde{P}' \hat{P}' \hat{P}_X \tilde{P}_X) &= \mu(P_X P' \tilde{P}' \tilde{P}_X) + \mu(\tilde{P}_X \tilde{P}' \hat{P}' \hat{P}_X) \\ &= \mu(B_i B_{i+1} A_{i+1} A_i) + \mu(A_i A_{i+1} G_{i+1} G_i) \\ &= \mu(B_i B_{i+1} A_{i+1} G_{i+1} G_i A_i) \end{aligned}$$

folgt dann die erste Gleichheit in (3.25) und die anderen Gleichheitszeichen ergeben sich analog. Eine Darstellung dieser Sachverhalte findet sich in den Abbildungen 3.4.13 und 3.4.14.

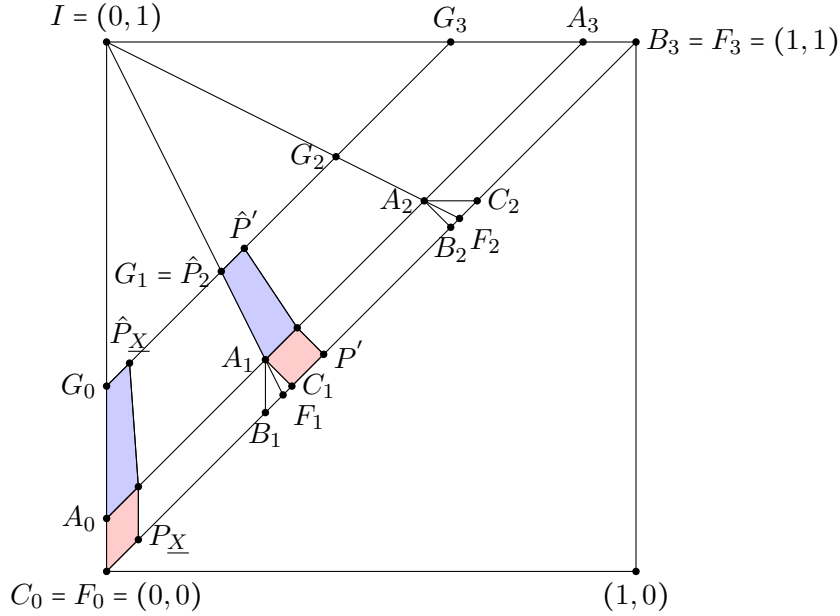


Abb. 3.4.13: Illustration von (3.25), wobei $P_X \in \overline{C_i B_{i+1}}$ für ein i gilt. Beide roten und beide blauen Vierecke besitzen nach Korollar 3.4.2 und dem Strahlensatz das gleiche Maß. Die Begründungen verlaufen analog zu den Begründungen in den Abbildungen 3.4.8 und 3.4.9.

Mit Korollar 3.4.1 erhalten wir wieder

$$|V_{n,k}(P_X P_Y \tilde{P}_Y \hat{P}_Y \tilde{P}_X \tilde{P}_X)| \lesssim (c_2(\beta, k) + c_3(\beta, k))n^k,$$

womit (3.24) gezeigt ist. □

Nun betrachten wir die oberen Schranken für den allgemeinen Fall $b \sim \beta n$. Dafür werden sich die folgenden beiden Lemmata als hilfreich erweisen.

Lemma 3.4.9. Sei $\beta \in (0, 1]$ und $1 = q\beta + r$, wobei $q \geq 1$ eine positive ganze Zahl ist und $0 \leq r < \beta$ gilt. Seien weiter

$$\begin{aligned} c_1(\beta, k) &= \frac{\beta^k}{k!} \left(k - \frac{k-1}{q} \right), \\ c_2(\beta, k) &= \frac{\beta^{k-1}}{(q+1)k!} (k - (k-1)\beta), \\ c_3(\beta, k) &= \frac{(\beta-r)^k}{(q+1)k!} q^{k-1}. \end{aligned}$$

Sei $M := \{\beta \in (0, 1) : 1 = q\beta + r \text{ mit } q \in \mathbb{N} \setminus \{0, 1\} \text{ und } r = 0\}$. Dann gilt für alle $\beta \in M$

$$\lim_{\beta' \searrow \beta} (c_2(\beta', k) + c_3(\beta', k)) = c_1(\beta, k).$$

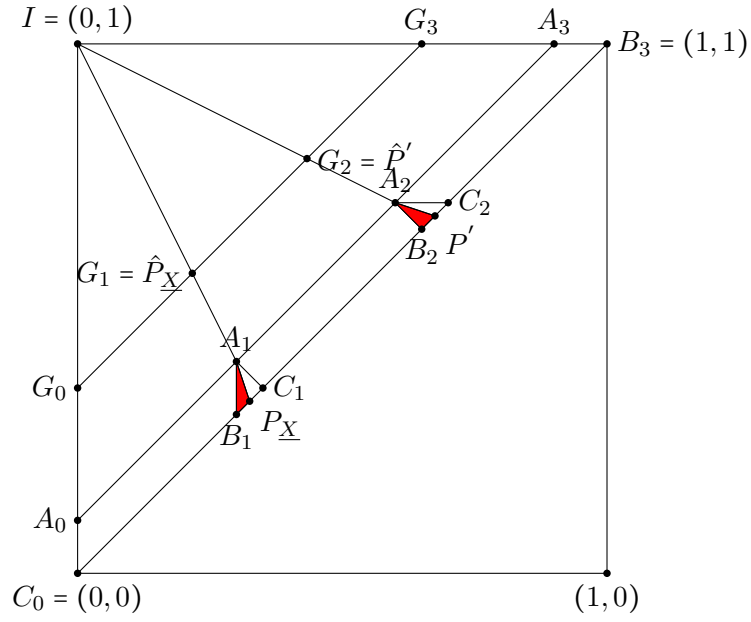


Abb. 3.4.14: Illustration von (3.25), wobei $P_X \in \overline{B_i C_i}$ für ein i gilt. Beide roten Vierecke besitzen nach Korollar 3.4.2 das gleiche Maß, da $\overline{B_i P_X} = \overline{B_{i+1} P'}$.

Beweis. Sei $\beta \in M$ beliebig. Dann ist $1 = \beta q$ für ein $q \geq 2$. Weiter sei $\beta' > \beta$ mit $1 = (q-1)\beta' + r'$ und $r' < \frac{(q-1)-1}{(q-1)^2+(q-1)-1}$ für $q > 2$ gegeben. Für $q = 2$ gibt es keine Einschränkungen an r' . Wir fassen $r' = 1 - (q-1)\beta'$ als Funktion von β' auf. Dann gilt

$$\lim_{\beta' \searrow \beta} r' = \beta.$$

Damit erhalten wir

$$\lim_{\beta' \searrow \beta} c_3(\beta', k) = \lim_{\beta' \searrow \beta} \frac{(\beta' - r')^k}{((q-1) + 1)k!} (q-1)^{k-1} = 0.$$

Außerdem gilt

$$\begin{aligned} \lim_{\beta' \searrow \beta} c_2(\beta', k) &= \lim_{\beta' \searrow \beta} \frac{(\beta')^{k-1}}{((q-1) + 1)k!} (k - (q-1)\beta') = \lim_{\beta' \searrow \beta} \frac{(\beta')^k}{qk!} \left(\frac{k}{\beta'} - (q-1) \right) \\ &= \frac{\beta^k}{qk!} \left(\frac{k}{\beta} - (q-1) \right) = \frac{\beta^k}{k!} \left(k - \frac{k-1}{q} \right) = c_1(\beta, k). \end{aligned}$$

Mit diesen beiden Grenzwerten folgt die Behauptung. \square

Lemma 3.4.10. Sei $b \geq \frac{n+k-1}{2}$ und es gelte $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b}{n} = \beta \in (0.5, 1]$. Dann gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{B(G_{n,k,b})}{n^k} = c_2(\beta, k) + c_3(\beta, k).$$

Beweis. Nach Satz 3.3.1 gilt

$$B(G_{n,k,b}) = \left\lceil \frac{(n-b+1) \binom{b}{k-1} + \binom{b}{k} + \binom{2b-n+1}{k} - 2}{2} \right\rceil.$$

Außerdem gilt $1 = \beta + r$, also $q = 1$ und $r < \beta$, wegen $\beta > 0.5$. Daraus ergibt sich $2\beta - 1 = 2\beta - \beta - r = \beta - r$. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{B(G_{n,k,b})}{n^k} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\left[\frac{(n-b+1)\binom{b}{k-1} + \binom{b}{k} + \binom{2b-n+1}{k} - 2}{2} \right]}{n^k} \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(n-b+1) \left(\frac{b^{k-1}}{(k-1)!} + O(b^{k-2}) \right) + \frac{b^k}{k!} + \frac{(2b-n)^k}{k!} + O(b^{k-1})}{2n^k} \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{k \left(\frac{b}{n} \right)^{k-1}}{2k!} - \frac{k \left(\frac{b}{n} \right)^k}{2k!} + \frac{\left(\frac{b}{n} \right)^k}{2k!} + \frac{(2\frac{b}{n} - 1)^k}{2k!} + o(1) \\
 &= \frac{\beta^{k-1}}{(1+1)k!} (k - (k-1)\beta) + \frac{(\beta - r)^k}{(1+1)k!} 1^{k-1} \\
 &= c_2(\beta, k) + c_3(\beta, k).
 \end{aligned}$$

□

Korollar 3.4.4. Sei $k \geq 2$ eine feste positive ganze Zahl. Sei $b \sim \beta n$ für $n \rightarrow \infty$ und sei $1 = q\beta + r$, wobei $q \geq 2$ eine positive ganze Zahl ist und $0 \leq r \leq \frac{q-1}{q^2+q-1}$ gilt. Dann ist

$$B(G_{n,k,b}) \lesssim c_1(\beta, k) n^k.$$

Beweis. Wir betrachten zunächst die β , für die $0 < r \leq \frac{q-1}{q^2+q-1}$ gilt. Zu einem ε mit $0 < \varepsilon \leq \frac{r}{q}$ betrachten wir $b' = b'(\varepsilon) = \lfloor (\beta + \varepsilon)n \rfloor$. Dann gilt $r' \geq 0$ und mit Lemma 3.4.6 erhalten wir

$$B(G_{n,k,b'}) \lesssim (c_1(\beta + \varepsilon, k)) n^k.$$

Weiter gilt für alle hinreichend großen n , dass $b \leq b'$ ist, womit nach Lemma 3.1.1

$$B(G_{n,k,b}) \leq B(G_{n,k,b'}) \lesssim (c_1(\beta + \varepsilon, k)) n^k$$

ist. Da das für jedes beliebige der betrachteten ε gilt, folgt mit der Stetigkeit der Funktion c_1 die Behauptung. Nun betrachten wir die β mit $1 = q\beta$ für ein $q \geq 3$, bei denen also $r = 0$ gilt. Wir betrachten nun solche $\varepsilon > 0$ für die $1 = (q-1)(\beta + \varepsilon) + r'$ mit $\frac{(q-1)-1}{(q-1)^2+(q-1)-1} < r' < \beta + \varepsilon$ gilt. Dies ist äquivalent zu

$$0 < \varepsilon < \frac{q-1}{(q-1)^2 + (q-1) - 1} - \beta.$$

Für solche ε betrachten wir wieder $b' = b'(\varepsilon) = \lfloor (\beta + \varepsilon)n \rfloor$. Zu beachten ist, dass wir uns jetzt durch diese Bedingungen im Fall b) befinden. Mit Lemma 3.4.8 folgt

$$B(G_{n,k,b'}) \lesssim (c_2(\beta + \varepsilon, k) + c_3(\beta + \varepsilon, k)) n^k.$$

Weiter gilt für alle hinreichend großen n , dass $b \leq b'$ ist, womit nach Lemma 3.1.1

$$B(G_{n,k,b}) \leq B(G_{n,k,b'}) \lesssim (c_2(\beta + \varepsilon, k) + c_3(\beta + \varepsilon, k)) n^k$$

ist. Da das für jedes beliebige der betrachteten ε gilt, folgt mit Lemma 3.4.9

$$B(G_{n,k,b}) \lesssim \lim_{\varepsilon \searrow 0} (c_2(\beta + \varepsilon, k) + c_3(\beta + \varepsilon, k)) n^k = c_1(\beta, k) n^k.$$

Als letztes betrachten wir den Fall $\beta = 0.5$, also $q = 2$. Zu einem ε mit $1 = (\beta + \varepsilon) + r'$ und $0 < \varepsilon < \beta$ betrachten wir $b' = b'(\varepsilon) = \lfloor (\beta + \varepsilon)n \rfloor$. Wir befinden uns im Fall b) mit $q = 1$, den wir exakt in Abschnitt 3.3 behandelt haben. Nach Lemma 3.4.10 gilt $B(G_{n,k,b'}) \sim (c_2(\beta + \varepsilon, k) + c_3(\beta + \varepsilon, k)) n^k$. Wie für $q \geq 3$ folgt mit den Lemmata 3.1.1 und 3.4.9

$$B(G_{n,k,b}) \lesssim \lim_{\varepsilon \searrow 0} (c_2(\beta + \varepsilon, k) + c_3(\beta + \varepsilon, k)) n^k = c_1(\beta, k) n^k.$$

□

Korollar 3.4.5. Sei $k \geq 2$ eine feste positive ganze Zahl. Sei $b \sim \beta n$ für $n \rightarrow \infty$ und sei $1 = q\beta + r$, wobei $q \geq 2$ eine positive ganze Zahl ist und $\frac{q-1}{q^2+q-1} < r < \beta$ gilt. Dann ist

$$B(G_{n,k,b}) \lesssim (c_2(\beta, k) + c_3(\beta, k)) n^k.$$

Beweis. Zu einem ε mit

$$0 < \varepsilon < \frac{r - \frac{q-1}{q^2+q-1}}{q}$$

betrachten wir $b' = b'(\varepsilon) = \lfloor (\beta + \varepsilon)n \rfloor$. Dann gilt $r' > \frac{q-1}{q^2+q-1}$ und mit Lemma 3.4.8 erhalten wir

$$B(G_{n,k,b'}) \lesssim (c_2(\beta + \varepsilon, k) + c_3(\beta + \varepsilon, k)) n^k.$$

Weiter gilt für alle hinreichend großen n , dass $b \leq b'$ ist, womit nach Lemma 3.1.1

$$B(G_{n,k,b}) \leq B(G_{n,k,b'}) \lesssim (c_2(\beta + \varepsilon, k) + c_3(\beta + \varepsilon, k)) n^k$$

ist. Da das für jedes beliebige der betrachteten ε gilt, folgt mit der Stetigkeit der Funktionen c_2 und c_3 die Behauptung. □

Damit sind die oberen Schranken in Satz 3.4.1 gezeigt und wir betrachten im nächsten Abschnitt die unteren Schranken.

3.4.3 Untere Schranken für die Bandbreite

Wir betrachten ein festes $\varepsilon > 0$, das hinreichend klein ist, insbesondere $\varepsilon < 1$. Sei P ein Polygon in Ω . Im Folgenden arbeiten wir mit zentrischen Streckungen von P bezüglich eines gegebenen Punktes mit Streckungsfaktoren der Form $(1 - \varepsilon)$ und $(1 + \varepsilon)$. Wir bezeichnen die neuen Polygone mit \underline{P} und \overline{P} . Dabei ist zu beachten, dass \underline{P} und \overline{P} sowohl von ε als auch dem Zentrum der Streckung abhängen. Außerdem gilt

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mu(\underline{P}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mu(\overline{P}) = \mu(P).$$

Lemma 3.4.11. *Es gilt*

$$|V_{n,k,b}| \sim \mu(F_0 F_{q+1} G_{q+1} G_0) n^k = (q+1) c_2(\beta, k) n^k.$$

Beweis. Zur Vereinfachung der Darstellung setzen wir $T = F_0 F_{q+1} G_{q+1} G_0$. Es ist zudem $T = \{(x, y) \in \Omega : y \leq x + \beta\}$. Wir wählen F_0 als das Streckungszentrum, sodass zum Beispiel die Eckpunkte von \underline{T} gegeben sind durch $\underline{F}_0 = (0, 0)$, $\underline{F}_{q+1} = (1 - \varepsilon)(1, 1)$, $\underline{G}_{q+1} = (1 - \varepsilon)(1 - \beta, 1)$, $\underline{G}_0 = (1 - \varepsilon)(0, \beta)$. Wenn die Streckungsfaktoren $(1 - \varepsilon)$ und $(1 + \varepsilon)$ sind, dann gilt $\underline{T} \subseteq \{(x, y) \in \Omega : y \leq x + (1 - \varepsilon)\beta\}$ und $\overline{T} \cap \Omega \subseteq \{(x, y) \in \Omega : y \leq x + (1 + \varepsilon)\beta\}$. Für hinreichend großes n und beliebiges $X \in \binom{[0,n]}{k}$ gelten die folgenden Implikationen:

$$\frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X}) \in \underline{T} \Rightarrow X \in V_{n,k,b} \Rightarrow \frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X}) \in \overline{T} \cap \Omega.$$

Demzufolge gilt auch

$$|V_{n,k}(\underline{T})| \leq |V_{n,k,b}| \leq |V_{n,k}(\overline{T} \cap \Omega)|$$

und mit Korollar 3.4.1 erhalten wir

$$\mu(\underline{T}) n^k \lesssim |V_{n,k,b}| \lesssim \mu(\overline{T}) n^k.$$

Schließlich ergibt sich mit Hilfe von Korollar 3.4.3 als Grenzwert für $\varepsilon \rightarrow 0$

$$|V_{n,k,b}| \sim \mu(T) n^k = (q+1) c_2(\beta, k) n^k.$$

□

Wie in Lemma 3.4.11 nutzen wir zentrische Streckungen, um die unteren asymptotischen Schranken zu beweisen. Dabei betrachten wir wieder ein festes ε mit $0 < \varepsilon < 1$, welches hinreichend klein ist.

Lemma 3.4.12. *Es gilt*

$$B(G_{n,k,b}) \gtrsim \frac{1}{q} \mu(F_0 C_q E_q G_0) n^k = c_1(\beta, k) n^k \text{ für } n \rightarrow \infty.$$

Beweis. Zur Vereinfachung der Darstellung setzen wir $Q = F_0 C_q E_q G_0$. Für die Streckung wählen wir wieder F_0 als Zentrum. Mit dem Streckungsfaktor $(1 - \varepsilon)$ erhalten wir \underline{Q} . Sei G' der durch

$$V' = \left\{ X \in V_{n,k,b} : \frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X}) \in \underline{Q} \right\}$$

induzierte Teilgraph von $G_{n,k,b}$. Zu beachten ist dabei, dass $\frac{1}{n} \overline{X} \leq q\beta(1 - \varepsilon)$ für alle $X \in V'$ ist.

Nun zeigen wir, dass für hinreichend großes n Folgendes gilt:

$$\text{diam}(G') \leq q. \tag{3.26}$$

Seien X und Y zwei verschiedene Knoten von G' . Dann gelten die folgenden Ungleichungen: $0 \leq \underline{X} \leq \overline{X} \leq q\beta(1-\varepsilon)n$ und $0 \leq \underline{Y} \leq \overline{Y} \leq q\beta(1-\varepsilon)n$. Nach Lemma 3.4.1 haben X und Y einen Abstand von höchstens q , falls n hinreichend groß ist. Dies beweist (3.26). Die untere Schranke von Chvátal (3.10) impliziert

$$B(G_{n,k,b}) \geq B(G') \geq \frac{|V'| - 1}{q} \gtrsim \frac{\mu(Q)}{q} n^k$$

und mit $\varepsilon \rightarrow 0$ ergibt sich

$$B(G_{n,k,b}) \gtrsim \frac{\mu(Q)}{q} n^k.$$

Sei der Übersichtlichkeit halber $Q_q = C_q B_{q+1} D_{q+1} E_q = C_q F_{q+1} G_{q+1} E_q$ und zur Erinnerung $T = F_0 F_{q+1} G_{q+1} G_0$. Dann ist $Q = T \setminus Q_q$ und deswegen

$$\mu(Q) = \mu(T) - \mu(Q_q).$$

Mit Korollar 3.4.3 folgt dann

$$\mu(Q) = (q+1)c_2(\beta, k) - ((q+1)c_2(\beta, k) - qc_1(\beta, k)) = qc_1(\beta, k).$$

□

Als nächstes beweisen wir die zweite untere Schranke, die allerdings nur auf den Fall b) anwendbar ist:

Lemma 3.4.13. *Falls $r > \frac{q-1}{q^2+q-1}$ ist, dann gilt*

$$\begin{aligned} B(G_{n,k,b}) &\gtrsim \left(\mu(F_0 F_1 G_1 G_0) + \frac{1}{q+1} \mu(B_1 C_1 H_1) \right) n^k \\ &= \left(c_2(\beta, k) + \frac{1}{q^{k-1}} c_3(\beta, k) \right) n^k. \end{aligned}$$

Beweis. Abkürzend schreiben wir $R = B_1 C_1 H_1$. Wir wählen $\frac{1}{2}(B_1 + C_1) = \frac{1}{2}(r + \beta, r + \beta)$ als Streckungszentrum und $(1 - \frac{2}{\beta-r}\varepsilon)$ als Streckungsfaktor und erhalten so \underline{R} aus R . Die Eckpunkte von \underline{R} sind $\underline{B}_1 = (r + \varepsilon, r + \varepsilon)$, $\underline{C}_1 = (\beta - \varepsilon, \beta - \varepsilon)$ und $\underline{H}_1 = (r + \varepsilon, \beta - \varepsilon)$.

Sei f eine Bandbreitennummerierung von $G_{n,k,b}$. Seien außerdem X_V und X^V diejenigen Knoten mit $f(X_V) = 1$ und $f(X^V) = |V_{n,k,b}|$.

Fall 1. $\underline{X}_V \leq n(r + \varepsilon)$ und $\underline{X}^V \leq n(r + \varepsilon)$.

Dann gilt für hinreichend kleine ε und hinreichend große n , dass $\overline{X}_V, \overline{X}^V \leq n(r + \varepsilon + \beta + \varepsilon) \leq 2\beta(1 - \varepsilon)n$ gilt. Lemma 3.4.1 impliziert, dass X_V und X^V einen Abstand von höchstens 2 haben, und aus Lemma 3.4.11 folgt dann

$$B(G_{n,k,b}) \geq \frac{|V_{n,k,b}| - 1}{2} \gtrsim \frac{q+1}{2} c_2(\beta, k) n^k \gtrsim \left(c_2(\beta, k) + \frac{1}{q^{k-1}} c_3(\beta, k) \right) n^k.$$

Fall 2. $\underline{X}_V > n(r + \varepsilon)$ und $\underline{X}^V > n(r + \varepsilon)$.

Hier gilt für hinreichend großes n , dass $\bar{X}^V - \bar{X}_V, \bar{X}_V - \bar{X}^V \leq n - n(r + \varepsilon) = (1 - r - \varepsilon)n = q\beta(1 - \frac{\varepsilon}{q\beta})n$. Aus Lemma 3.4.1 folgt, dass X_V und X^V einen Abstand von höchstens q haben und Lemma 3.4.11 impliziert dann

$$B(G_{n,k,b}) \geq \frac{|V_{n,k,b}| - 1}{q} \gtrsim \frac{q+1}{q} c_2(\beta, k) n^k \gtrsim \left(c_2(\beta, k) + \frac{1}{q^{k-1}} c_3(\beta, k) \right) n^k.$$

Die letzte asymptotische Ungleichung lässt sich dabei wie folgt begründen. Sie ist äquivalent zu

$$\begin{aligned} \frac{q+1}{q} c_2(\beta, k) &\geq c_2(\beta, k) + \frac{1}{q^{k-1}} c_3(\beta, k) \\ \iff \frac{c_2(\beta, k)}{q} &\geq \frac{c_3(\beta, k)}{q^{k-1}} \\ \iff q^{k-2} c_2(\beta, k) &\geq c_3(\beta, k). \end{aligned}$$

Einsetzen der c -Funktionen ergibt

$$q^{k-2} \frac{\beta^{k-1}}{(q+1)k!} (k - (k-1)\beta) \geq \frac{(\beta-r)^k}{(q+1)k!} q^{k-1} \iff \beta^{k-1} (k - (k-1)\beta) \geq (\beta-r)^k q.$$

Wegen $(k - (k-1)\beta) \geq 1$ genügt es $\beta^{k-1} \geq (\beta-r)^k q$ zu zeigen. Dies folgt aber direkt aus $\beta^{k-1} \geq (\beta-r)^{k-1}$ und $1 \geq \beta q \geq (\beta-r)q$.

Fall 3. $\underline{X}_V \leq n(r + \varepsilon)$ und $\underline{X}^V > n(r + \varepsilon)$.

Seien $X_R = \arg \min\{f(X) : X \in V_{n,k}(\underline{R})\}$ und $X^R = \arg \max\{f(X) : X \in V_{n,k}(\underline{R})\}$. Dann gilt klarerweise

$$f(X^R) - f(X_R) \geq |V_{n,k}(\underline{R})| - 1. \quad (3.27)$$

In Anbetracht von $n(r + \varepsilon) \leq \underline{X}^R \leq \bar{X}^R \leq n(\beta - \varepsilon)$, $\underline{X}_V \geq 0$, $\bar{X}_V \leq n(r + \varepsilon) + b$ und $r < \beta$ erhalten wir $\bar{X}_V - \underline{X}^R \leq b$ und $\bar{X}^R - \underline{X}_V \leq \bar{X}^R \leq n(\beta - \varepsilon) \leq b$, falls ε hinreichend klein und n hinreichend groß ist. Demzufolge sind nach Lemma 3.1.2 X_V und X^R benachbart und damit gilt

$$f(X^R) - f(X_V) \leq B(G_{n,k,b}). \quad (3.28)$$

In Anbetracht von $\underline{X}_R, \underline{X}^V \geq n(r + \varepsilon)$ und analog zu Fall 2 haben X_R und X^V einen Abstand von höchstens q zueinander und somit gilt

$$f(X^V) - f(X_R) \leq qB(G_{n,k,b}). \quad (3.29)$$

Aus (3.27), (3.28) und (3.29) erhalten wir

$$f(X^V) - f(X_V) \leq (q+1)B(G_{n,k,b}) - (|V_{n,k}(\underline{R})| - 1)$$

und mit Korollar 3.4.3 und Lemma 3.4.11 ergibt sich

$$B(G_{n,k,b}) \gtrsim c_2(\beta, k) n^k + \left(1 - \frac{2}{\beta - r} \varepsilon\right)^2 \frac{1}{q^{k-1}} c_3(\beta, k) n^k.$$

Durch Grenzwertbetrachtung $\varepsilon \rightarrow 0$ erhalten wir die Behauptung. \square

Damit ist Satz 3.4.1 vollständig bewiesen.

3.5 Verallgemeinerung von $k \in [2, b+1]$ auf $K \subseteq [2, b+1]$

In diesem Abschnitt nehmen wir noch eine Verallgemeinerung der Ergebnisse dieses Kapitels vor. Wir betrachten nicht mehr nur eine feste Mächtigkeit $k \in [2, b+1]$, sondern lassen verschiedene Mächtigkeiten aus einer Menge $K \subseteq [2, b+1]$ zu. Dazu erinnern wir uns an die im Abschnitt 2.5 motivierten Hypergraphen. Bisher haben wir angenommen, dass diese k -uniform waren. Wenn deren Hyperkanten aber unterschiedliche Mächtigkeiten besitzen, so müssen wir im transformierten Graphen auch Knoten zulassen, deren zugehörige Mengen unterschiedliche Mächtigkeiten haben. Diese Verallgemeinerung wollen wir nun vornehmen und aufbauend auf den bisherigen Ergebnissen die Bandbreite des im Folgenden definierten verallgemeinerten Graphen $G_{n,K,b}$ für verschiedene Fälle bestimmen.

Für die weiteren Betrachtungen definieren wir $k_{\min} := \min(K)$ und $k_{\max} := \max(K)$. Sei nun $G_{n,K,b}$ der Graph mit Knotenmenge

$$V_{n,K,b} := \left\{ X \in \left(\bigcup_{k \in K} \binom{[0,n]}{k} \right) : \overline{X} - \underline{X} \leq b \right\}$$

und Kantenmenge

$$E_{n,K,b} := \{ \{X, Y\} \in V_{n,K,b} : \overline{X \cup Y} - \underline{X \cup Y} \leq b \}.$$

Aus Lemma 3.1.4 folgt durch Aufsummieren der einzelnen Knotenanzahlen

$$|V_{n,K,b}| = (n - b + 1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1} + \sum_{k \in K} \binom{b}{k}. \quad (3.30)$$

Wichtig ist auch der Durchmesser von $G_{n,K,b}$. Dazu nutzen wir verallgemeinerte Versionen von Lemma 3.1.3 und von Korollar 3.1.1.

Lemma 3.5.1. *Sei $K \subseteq [2, b+1]$ mit $k_{\min} := \min(K)$ und $k_{\max} := \max(K)$. Sei $0 \leq i < j \leq n - (k_{\min} - 1)$. Die Knoten $[i, i + k_{\min} - 1]$ und $[j, j + k_{\min} - 1]$ haben einen Abstand von $\lceil \frac{j-i}{b-k_{\min}+1} \rceil$ in $G_{n,K,b}$.*

Beweis. Mit $j - i = q(b - k_{\min} + 1) + r$, wobei q eine ganze Zahl und $1 \leq r \leq b - k_{\min} + 1$ ist, ergibt sich wie im Beweis von Lemma 3.1.3, dass der Abstand der Knoten $[i, i + k_{\min} - 1]$ und $[j, j + k_{\min} - 1]$ höchstens $q + 1$ beträgt. Wir nehmen nun an, dass die Knoten

$$X_0 = [i, i + (k_{\min} - 1)], X_1, \dots, X_{l-1}, [j, j + (k_{\min} - 1)] = X_l$$

einen Weg der Länge l in $G_{n,K,b}$ bilden. Dann haben wir für $t = 1, \dots, l$, $\overline{X}_t - \underline{X}_{t-1} \leq b$ und $\overline{X}_t - \underline{X}_t \geq k_{\min} - 1$, was

$$\underline{X}_t - \underline{X}_{t-1} \leq b - (k_{\min} - 1) \quad (3.31)$$

impliziert. Damit sehen wir wie im Beweis von Lemma 3.1.3, dass der Abstand mindestens $q + 1$ beträgt. \square

Korollar 3.5.1. Seien $K \subseteq [2, b+1]$ mit $k_{\min} = \min(K)$, $X, Y \in V_{n,K,b}$ und sei $\underline{X} < \underline{Y}$ oder $\underline{X} = \underline{Y}$ sowie $\overline{X} < \overline{Y}$. Dann haben X und Y höchstens den Abstand $\lceil \frac{\overline{Y} - \underline{X} - b}{b - k_{\min} + 1} \rceil + 1$.

Beweis. Der Beweis verläuft analog zum Beweis von Korollar 3.1.1. Seien $i = \underline{X}$ und $j = \overline{Y}$. Zu beachten ist hierbei, dass für beliebige $i, j \in [0, n]$ mit $i < j$ gilt $\arg \min\{k \in K : \lceil \frac{j-i}{b-k+1} \rceil\} = k_{\min}$. Da unabhängig von den Mächtigkeiten von X und Y sowohl X zu $X_1 = [i+b-k_{\min}+1, i+b]$ als auch Y zu $Y_1 = [j-b, j-b+k_{\min}-1]$ benachbart ist, kann analog zum Beweis von Korollar 3.1.1 hier Lemma 3.5.1 angewendet werden. \square

Nach Korollar 3.5.1 beträgt der Abstand zweier beliebiger Knoten von $G_{n,K,b}$ höchstens $\lceil \frac{n-0-b}{b-k_{\min}+1} \rceil + 1 = \lceil \frac{n-k_{\min}+1}{b-k_{\min}+1} \rceil$ und nach Lemma 3.5.1 haben die Knoten $[0, k_{\min}-1]$ und $[n-k_{\min}+1, n]$ einen Abstand von $\lceil \frac{n-k_{\min}+1}{b-k_{\min}+1} \rceil$. Dementsprechend gilt

$$\text{diam}(G_{n,K,b}) = \left\lceil \frac{n-k_{\min}+1}{b-k_{\min}+1} \right\rceil. \quad (3.32)$$

Damit können wir nun eine verallgemeinerte Version von Satz 3.2.1 angeben.

Satz 3.5.1. Sei $K \subseteq \mathbb{N} \setminus \{0, 1\}$ eine feste endliche Menge mit minimalem Element k_{\min} und maximalem Element k_{\max} und es gelte $1 \leq k_{\max} - 1 \leq b \leq n$. Wenn $b = o(n^{\frac{1}{k_{\max}+1}})$ ist, dann gilt für hinreichend großes n

$$B(G_{n,K,b}) = (b - k_{\min} + 1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1}.$$

Wenn $b = o(n)$ ist, dann gilt

$$B(G_{n,K,b}) \sim (b - k_{\min} + 1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1} \text{ für } n \rightarrow \infty.$$

Beweis. Der Beweis der oberen Abschätzung erfolgt analog zum Beweis von Lemma 3.2.1 mittels der lexikographischen Anordnung der Knoten, siehe (3.1). Hierbei ist nur zu beachten, dass zwischen zwei benachbarten Knoten X, Y mit $X <_{\text{lex}} Y$ nun weitere Knoten liegen. Seien $X' = [\underline{X}, \underline{X} + k_{\min} - 1]$ und

$$Y' = \begin{cases} [\underline{X} + b - k_{\min} + 1, \underline{X} + b], & \text{falls } \underline{X} + b \leq n \\ [n - k_{\min} + 1, n], & \text{sonst.} \end{cases}$$

Dann ist

$$X' \leq_{\text{lex}} X <_{\text{lex}} Y \leq_{\text{lex}} Y'. \quad (3.33)$$

Wegen

$$|\{X \in V_{n,K,b} : \underline{X} = j\}| \leq \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1}$$

für $j \in [n]$ und da Y' der lexikographisch kleinste Knoten mit kleinstem Element \underline{Y}' ist, wobei $\underline{Y}' \leq \underline{X} + b - k_{\min} + 1$ gilt, folgt schließlich

$$|f_{lex}(Y) - f_{lex}(X)| \leq (b - k_{\min} + 1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1}.$$

Für den Beweis der unteren Schranke nutzen wir analog zum Beweis von Satz 3.2.1 die Fakten (3.10), (3.30) und (3.32). Außerdem gilt $\sum_{k \in K} (k-1) \binom{b+1}{k} = O(b^{k_{\max}})$ für $b \rightarrow \infty$. Damit erhalten wir für $n \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} B(G_{n,K,b}) &\geq \left\lceil \frac{|V_{n,K,b}| - 1}{\text{diam}(G_{n,K,b})} \right\rceil = \left\lceil \frac{(n+1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1} - \sum_{k \in K} (k-1) \binom{b+1}{k} - 1}{\left\lceil \frac{n-k_{\min}+1}{b-k_{\min}+1} \right\rceil} \right\rceil \\ &= \frac{(n+1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1} + O(b^{k_{\max}})}{\frac{n-k_{\min}+1}{b-k_{\min}+1} + O(1)} \\ &= \frac{(n+1)(b-k_{\min}+1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1} + O(b^{k_{\max}+1})}{n + O(b)} \\ &= \frac{(b-k_{\min}+1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1} + O(\frac{b^{k_{\max}+1}}{n})}{1 + O(\frac{b}{n})}. \end{aligned}$$

Im Falle von $b = o(n^{\frac{1}{k_{\max}+1}})$ ergibt sich schließlich analog zum Beweis von Satz 3.2.1 $B(G_{n,K,b}) \geq (b - k_{\min} + 1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1}$ für hinreichend großes n . Falls $b = o(n)$ ist, dann folgt $B(G_{n,K,b}) \gtrsim (b - k_{\min} + 1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1}$ für $n \rightarrow \infty$. \square

Bisher haben wir immer $k_{\min} \geq 2$ betrachtet, da einelementige Mengen einen entarteteten Fall darstellen, da Minimum und Maximum dieser Mengen immer identisch sind. Somit sind sie für das betrachtete Problem nicht sehr interessant und für die Anwendung sind sie außerdem bedeutungslos. Einige Resultate gelten jedoch auch für $k_{\min} = 1$, insbesondere Lemma 3.5.1, Korollar 3.5.1 und (3.30) sowie (3.32). Da wir nur an dieser einen Stelle Gebrauch davon machen wollen, haben wir die Resultate zur einheitlichen Darstellung alle mit $K \subseteq [2, b+1]$ formuliert. Wenn wir nun ausnahmsweise den Fall $K = [1, b+1]$ betrachten, wobei K somit auch abhängig von b und damit von n ist, können wir noch ein ähnlich zu beweisendes Resultat angeben. Aus (3.30) und (3.32) ergibt sich

$$\begin{aligned} V_{n,[1,b+1],b} &= (n - b + 2)2^b - 1, \\ \text{diam}(G_{n,[1,b+1],b}) &= \left\lceil \frac{n}{b} \right\rceil. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir:

Proposition 3.5.1. Für $\varepsilon > 0$ und $b \leq (1 - \varepsilon) \log_2(n)$ gilt für hinreichend großes n

$$B(G_{n,[1,b+1],b}) = b \cdot 2^b.$$

Falls $b = o(n)$ für $n \rightarrow \infty$ ist, so gilt

$$B(G_{n,[1,b+1],b}) \sim b \cdot 2^b.$$

Beweis. Die obere Schranke folgt wie im Beweis von Satz 3.5.1. Die untere Schranke folgt aus der Tatsache, dass $b^2 2^b \leq ((1-\varepsilon) \log_2(n))^2 n^{1-\varepsilon} = o(n)$ für $b \leq (1-\varepsilon) \log_2(n)$ und $n \rightarrow \infty$ ist. Somit gilt asymptotisch für $n \rightarrow \infty$: $B(G_{n,[1,b+1],b}) \geq \frac{|V_{n,[1,b+1],b}| - 1}{\text{diam}(G_{n,[1,b+1],b})} = \frac{(n-b+2)2^b - 1}{\lceil \frac{n}{b} \rceil} = \frac{nb2^b - (b-2)b2^b - 2b}{n+O(b)} = \frac{nb2^b + o(n)}{n+O(b)} = b \cdot 2^b + o(1)$. Für hinreichend große n gilt also $B(G_{n,[1,b+1],b}) = b \cdot 2^b$. Falls $b = o(n)$ ist, so gilt

$$\frac{(n-b+2)2^b - 2}{\lceil \frac{n}{b} \rceil} \sim b \cdot 2^b.$$

□

Für das exakte Resultat aus Abschnitt 3.3 ergibt sich folgende Verallgemeinerung.

Satz 3.5.2. Sei $K \subseteq \mathbb{N} \setminus \{0, 1\}$ eine feste endliche Menge mit minimalem Element k_{\min} und maximalem Element k_{\max} und es gelte $1 \leq k_{\max} - 1 \leq b \leq n$. Wenn $b \geq \frac{n+k_{\min}-1}{2}$ gilt, dann ist

$$B(G_{n,K,b}) = \left\lfloor \frac{(n-b+1) \sum_{k \in K} \binom{b}{k-1} + \sum_{k \in K} \binom{b}{k} + \sum_{k \in K} \binom{2b-n+1}{k} - 2}{2} \right\rfloor.$$

Um dies zu zeigen, definieren wir die einfache Palindromordnung zur Zerlegung $R'' = R_0'' \cup R_1''$ identisch zu Abschnitt 3.3 auf $V_{n,K,b}$ mit der Definition der lexikographischen Ordnung aus (3.1). Wichtig ist wieder, dass $C \neq \emptyset$ ist, was analog zu Bemerkung 3.3.1 genau dann der Fall ist, wenn $b \geq \frac{n+k_{\min}-1}{2}$ ist. Außerdem gilt

$$|C| = \sum_{k \in K} \binom{2b-n+1}{k}. \quad (3.34)$$

Nun verallgemeinern wir Lemma 3.3.2.

Lemma 3.5.2. Sei \leq_{spo} eine einfache Palindromordnung zu einer beliebigen balancierten Zerlegung $R'' = A \cup B$. Seien X, Y zwei benachbarte Knoten aus $V_{n,K,b}$ mit $X <_{spo} Y$ und maximaler f_{spo} -Distanz, wobei zusätzlich \underline{X} minimal oder \overline{Y} maximal ist. Mit $k_{\min} = \min K$ ist dann $X = [0, k_{\min} - 1]$ und $Y = [b - k_{\min} + 1, b]$ oder $X = [n - b, n - b + k_{\min} - 1]$ und $Y = [n - k_{\min} + 1, n]$.

Beweis. Mit $I_i = \{X \in V_{n,K,b} : [i, i + k_{\min} - 1] \leq_{spo} X \leq_{spo} [i + b - k_{\min} + 1, i + b]\}$ ist die Abbildung $X = (i_1, i_2, \dots, i_k) \mapsto (i_1 - 1, i_2 - 1, \dots, i_k - 1) = \tilde{X}$ eine Injektion ϕ von I_i nach I_{i-1} . Der Beweis geht analog zum Beweis von Lemma 3.3.2, da nur das jeweilige Minimum und Maximum der Mengen relevant ist. Da unter allen Paaren $X = [0, k - 1]$ und $Y = [b - k + 1, b]$ für $k \in K$ das Paar $X = [0, k_{\min} - 1]$ und $Y = [b - k_{\min} + 1, b]$ die größte f_{spo} -Distanz hat und Analoges auch für $X = [n - b, n - b + k_{\min} - 1]$ und $Y = [n - k_{\min} + 1, n]$ gilt, folgt die Behauptung. □

Völlig analog zu Lemma 3.3.3 erfolgt der Beweis von:

Lemma 3.5.3. *Sei \leq_{spo} eine einfache Palindromordnung zu einer beliebigen balancierten Zerlegung $R'' = A \cup B$. Dann gilt $B_{f_{spo}}(G_{n,K,b}) = \left\lceil \frac{|V_{n,K,b}| + |C| - 2}{2} \right\rceil$.*

Man ersetze einfach $[0, k-1]$, $[b-k+1, b]$, $[n-b, n-b+k-1]$ und $[n-k+1, n]$ durch die entsprechenden Versionen mit k_{min} statt k . Der Beweis der unteren Schranke in Satz 3.5.2 läuft schließlich mit Bezug zu (3.34) und (3.30) analog zu diesem Beweisteil von Satz 3.3.1 ab.

Schließlich verallgemeinern wir noch die asymptotischen Resultate aus Abschnitt 3.4. Es gilt folgende verallgemeinerte Version von Satz 3.4.1.

Satz 3.5.3. *Sei $K \subseteq \mathbb{N} \setminus \{0, 1\}$ eine feste endliche Menge mit maximalem Element k_{max} . Sei $b \sim \beta n$ für $n \rightarrow \infty$ und sei $1 = q\beta + r$, wobei $q \geq 2$ eine positive ganze Zahl ist und $0 \leq r < \beta$ gilt. Seien*

$$\begin{aligned} c_1(\beta, k) &= \frac{\beta^k}{k!} \left(k - \frac{k-1}{q} \right), \\ c_2(\beta, k) &= \frac{\beta^{k-1}}{(q+1)k!} (k - (k-1)\beta), \\ c_3(\beta, k) &= \frac{(\beta-r)^k}{(q+1)k!} q^{k-1}. \end{aligned}$$

a) Wenn $r \leq \frac{q-1}{q^2+q-1}$ ist, dann gilt $B(G_{n,K,b}) \sim c_1(\beta, k_{max}) n^{k_{max}}$.

b) Wenn $r > \frac{q-1}{q^2+q-1}$ ist, dann gelten

$$\begin{aligned} B(G_{n,K,b}) &\gtrsim \max\{c_1(\beta, k_{max}), c_2(\beta, k_{max}) + \frac{1}{q^{k_{max}-1}} c_3(\beta, k_{max})\} n^{k_{max}}, \\ B(G_{n,K,b}) &\lesssim (c_2(\beta, k_{max}) + c_3(\beta, k_{max})) n^{k_{max}}. \end{aligned}$$

Analog zu (3.14) definieren wir die verallgemeinerten Knotenmengen, die in Polygonen $P \in \Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq x \leq y \leq 1\}$ eingebettet sind. Es seien

$$\begin{aligned} V_{n,K}(P) &= \left\{ X \in \bigcup_{k \in K} \binom{[0, n]}{k} : \frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X}) \in P \right\}, \\ V_{n,K}^o(P) &= \left\{ X \in \bigcup_{k \in K} \binom{[0, n]}{k} : \frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X}) \in \text{int}(P) \right\}. \end{aligned} \tag{3.35}$$

Damit gelten die Zerlegungen

$$\begin{aligned} V_{n,K}(P) &= \bigcup_{k \in K} V_{n,k}(P), \\ V_{n,K}^o(P) &= \bigcup_{k \in K} V_{n,k}^o(P). \end{aligned} \tag{3.36}$$

Da bei der asymptotischen Analyse Terme niedrigerer Ordnung vernachlässigt werden können, ist nur $k_{max} = \max(K)$ relevant. Damit folgt direkt aus Lemma 3.4.2, dass

$$|V_{n,K}^o(P)| \sim |V_{n,K}(P)| \sim \left(\frac{1}{(k_{max} - 2)!} \iint_P (y - x)^{k_{max} - 2} dx dy \right) n^{k_{max}} \text{ für } n \rightarrow \infty$$

gilt. Mit dem verallgemeinerten Maß

$$\tilde{\mu}(P) = \frac{1}{(k_{max} - 2)!} \iint_P (y - x)^{k_{max} - 2} dx dy \quad (3.37)$$

können wir auch Korollar 3.4.1 wie folgt verallgemeinern.

Korollar 3.5.2. *Sei $K \subseteq \mathbb{N} \setminus \{0, 1\}$ endlich und sei $k_{max} = \max(K)$. Wenn $S \subseteq \bigcup_{k \in K} \binom{[0, n]}{k}$ eine Familie von Mengen ist, die alle $X \in \bigcup_{k \in K} \binom{[0, n]}{k}$ mit $\frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X}) \in \text{int}(P)$ und einige $X \in \bigcup_{k \in K} \binom{[0, n]}{k}$ mit $\frac{1}{n}(\underline{X}, \overline{X})$ auf dem Rand von P enthält, dann ist*

$$|S| \sim \tilde{\mu}(P) n^{k_{max}} \text{ für } n \rightarrow \infty.$$

Damit laufen alle weiteren Betrachtungen analog zu denen von Abschnitt 3.4 für $G_{n, k_{max}, b}$ ab. Die Elemente mit unterschiedlichen Mächtigkeiten werden gemäß ihrer projizierten Position in Ω wie in Abschnitt 3.4.2 angeordnet. Da dafür nur das Maximum und das Minimum der Mengen relevant ist, ergibt sich durch die unterschiedlichen Mächtigkeiten kein Problem. Asymptotisch unterscheidet sich die Bandbreite von $G_{n, K, b}$ also nicht von der von $G_{n, k_{max}, b}$, da die Anzahl der Mengen mit Mächtigkeit kleiner als k_{max} asymptotisch vernachlässigbar klein ist.

Kapitel 4

Zusammenfassung und Ausblick

Im ersten Teil der Arbeit haben wir eine mathematische Modellierung der von Multielektrodenarrays aufgezeichneten Signale von Neuronen vorgenommen. Diese beinhaltet die Modellierung der Geometrie des Multielektrodenarrays sowie der Form der aufgezeichneten Signale. Darauf aufbauend wurde ein Algorithmus entwickelt, der zu jedem aufgezeichneten Neuron die sogenannte Nachbarschaft ermittelt. Dies ist die Menge der Elektroden, die die Signale des Neurons aufgezeichnet haben. Wir haben dabei eine methodische Weiterentwicklung gegenüber einem bereits in der Literatur vorgestellten Ansatz erhalten. Mögliche zeitliche Verzögerungen in den Signalaufzeichnungen wurden hier explizit berücksichtigt. Grundvoraussetzung dafür ist der elektrische Kontakt des Neurons zu mindestens zwei Elektroden. Andernfalls funktioniert der verwendete Ansatz nicht, da der Vergleich der Aufzeichnungen von verschiedenen Elektroden ein essentieller Bestandteil dieses Ansatzes ist.

Bei simulierten Daten konnten mit der obigen Methode gute Ergebnisse erzielt werden. Bei den getesteten realen Daten waren die Ergebnisse allerdings schlechter, da die notwendige Voraussetzung des mehrfachen elektrischen Kontaktes nicht für ausreichend viele Neuronen erfüllt war.

Des Weiteren wurde der betrachtete Ansatz unter weiteren theoretischen Annahmen zu einem Spike-Sorting-Ansatz, also der Zuordnung der einzelnen Signale zu einem Neuron, weiterentwickelt. Dieser könnte in Kombination mit bestehenden Spike-Sorting-Ansätzen, die zu einem großen Teil auf der Analyse der Wellenformen beruhen, zu einer Verbesserung der Genauigkeit der Signalzuordnung führen, da zusätzliche relevante Informationen über die Signale gewonnen werden.

Danach haben wir ein gewichtetes Kantenüberdeckungsproblem formuliert, um mit fälschlicherweise nicht aufgezeichneten Spikes umzugehen, die zu einer Häufung von unvollständigen Teilnachbarschaften führen können. Um dieses Problem algorithmisch effizient zu lösen, bedienten wir uns einer Transformation auf ein gewichtetes Knotencliquenüberdeckungsproblem und machten uns die beschränkte Bandbreite des durch die Nachbarschaftsschätzung entstandenen Hypergraphen

zunutze. Das inspirierte zur Untersuchung der Bandbreite einer speziellen Graphenklasse, die wir mit $G_{n,K,b}$ bezeichnen.

Der zweite Teil der Arbeit behandelte dann umfassend die Bandbreitenbestimmung von $G_{n,K,b}$. Dabei wurden mehrere Fälle unterschieden und unterschiedliche Nummerierungen der Knoten betrachtet. Dabei gelang es mittels elementarer und analytischer Methoden, zumindest die asymptotische Optimalität in den meisten Fällen zu beweisen.

Im Hinblick auf zukünftige Forschung ist zu bemerken, dass durch die Einführung von Multielektrodenarrays mit höherer Elektrodendichte die Nachbarschaft der Neuronen für den praktischen Einsatz des entwickelten Verfahrens hinreichend groß sein wird. Des Weiteren könnte die Entwicklung gewinnbringender Kombinationen der verschiedenen Spike-Sorting-Ansätze, wie zum Beispiel der Nachbarschaftsbestimmung und der klassischen Wellenformencluster-Methoden, vorangetrieben werden.

Bei der Bandbreitenbestimmung in Abschnitt 3.4 existiert noch eine Lücke in dem Sinne, dass die obere und untere Schranke für einen Fall nicht übereinstimmen. Im Zuge künftiger Forschung könnte diese Lücke vielleicht geschlossen werden. Weiterhin bleibt offen, ob nicht mithilfe besserer Methoden sogar eine exakte Bestimmung der Bandbreite in den Fällen möglich ist, bei denen wir nur asymptotische Resultate angegeben haben. Die verwendete Methode, den Graphen in das Einheitsquadrat zu projizieren, um dort asymptotische Untersuchungen zur Bandbreite des Graphen für große n vorzunehmen, könnte zudem bei der Bestimmung der Bandbreite weiterer Graphenklassen hilfreich sein. Dies wäre ein Untersuchungsgegenstand für weitere Arbeiten in dieser Richtung.

Literaturverzeichnis

- [1] R. Akhtar, T. Jiang, Z. Miller. Asymptotic determination of edge-bandwidth of multidimensional grids and Hamming graphs. *SIAM J. Discrete Math.*, 22(2), 425-449, 2008.
- [2] H. Azami, S. Sanei. Spike detection approaches for noisy neuronal data: Assessment and comparison. *Neurocomputing*, 133(0):491–506, 2014.
- [3] J. Balogh, S.L. Bezrukov, L.H. Harper, A. Seress. On the bandwidth of 3-dimensional Hamming graphs. *Theoretical Computer Science*, 407(1–3), 488–495, 2008.
- [4] T. Berger-Wolf, E.M. Reingold. Index assignment for multichannel communication under failure. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 48, 2656–2668, 2002.
- [5] T.J. Blanche, M.A. Spacek, J.F. Hetke, N.V. Swindale. Polytrodes: High-density silicon electrode arrays for large-scale multiunit recording. *Journal of Neurophysiology*, 93(5):2987–3000, 2005.
- [6] M. Blanchette, E. Kim, A. Vetta. Clique cover on sparse networks. *Proceedings of the Meeting on Algorithm Engineering & Experiments, ALENEX '12*, 93–102, 2012.
- [7] G.D. Brown, S. Yamada, T.J. Sejnowski. Independent component analysis at the neural cocktail party. *Trends in Neurosciences*, 24(1):54 – 63, 2001.
- [8] P.Z. Chinn, J. Chvátalová, A.K. Dewdney, N.E. Gibbs. The bandwidth problem for graphs and matrices: a survey. *J. Graph Theory*, 6, 223–254, 1982.
- [9] L. Condat. A Direct Algorithm for 1-D Total Variation Denoising. *Signal Processing Letters*, 20(11):1054–1057, 2013.
- [10] V. Chvátal. A remark on a problem of Harary. *Czechoslovak Mathematical Journal*, 20(1), 109–111, 1970.
- [11] J. Chvátalová. Optimal labelling of a product of two paths. *Discrete Math.*, 11(3), 249–253, 1975.

- [12] F.R.K. Chung. Labeling of graphs, in *Selected Topics in Graph Theory 3*, L.W. Beineke and R.J. Wilson, eds. Academic Press, San-Diego, 151–168, 1988.
- [13] T.H. Cormen, C.E. Leiserson, R. Rivest, C. Stein. *Algorithmen - Eine Einführung*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 2. Auflage, 2007.
- [14] E. Cuthill, J. McKee. Reducing the bandwidth of sparse symmetric matrices. *Proceedings of the 1969 24th national conference*, 157–172, 1969.
- [15] C. Dubey, U. Feige, W. Unger. Hardness results for approximating the bandwidth. *Journal of Computer and System Sciences*, 77, 62–90, 2010.
- [16] G.T. Einevoll, F. Franke, E. Hagen, C. Pouzat, K.D. Harris. Towards reliable spike-train recordings from thousands of neurons with multielectrodes. *Current Opinion in Neurobiology*, 22(1):11 – 17, 2012.
- [17] K. Engel. *Sperner Theory*. Cambridge University Press, 1. Auflage, 1997.
- [18] M.S. Fee, P.P. Mitra, D. Kleinfeld. Variability of extracellular spike waveforms of cortical neurons. *Journal of Neurophysiology*, 76(6):3823–3833, 1996.
- [19] F. Franke, M. Natora, C. Boucsein, M.H.J. Munk, K. Obermayer. An online spike detection and spike classification algorithm capable of instantaneous resolution of overlapping spikes. *Journal of Computational Neuroscience*, 29(1–2):127–148, 2010.
- [20] N.E. Gibbs, W.G. Poole Jr., P.K. Stockmeyer. An algorithm for reducing the bandwidth and profile of a sparse matrix. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 13(2), 236–250, 1976.
- [21] S. Gibson, J.W. Judy, D. Marković. Spike sorting: The first step in decoding the brain. *Signal Processing Magazine, IEEE*, 29(1):124 –143, 2012.
- [22] L.H. Harper. Optimal assignments of numbers to vertices. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 12(1), 131–135, 1964.
- [23] L.H. Harper. Optimal numberings and isoperimetric problems on graphs. *J. Combin. Theory*, 1(3), 385–393, 1966.
- [24] L.H. Harper. On an isoperimetric problem for Hamming graphs. *Discrete Appl. Math.*, 95, 285–309, 1999.
- [25] L.H. Harper. On the bandwidth of a Hamming graph. *Theoretical Computer Science*, 301, 491–498, 2003.
- [26] U. Hendrich, M. Stiebitz. On the bandwidth of graph products. *J. Inform. Process. Cybernet.*, 28, 113–125, 1992.

- [27] D. Jäckel, U. Frey, M. Fiscella, F. Franke, A. Hierlemann. Applicability of independent component analysis on high-density microelectrode array recordings. *Journal of Neurophysiology*, 108(1):334–348, 2012.
- [28] R.M. Karp. Reducibility among combinatorial problems. *Complexity of Computer Computations*, 85–103, 1972.
- [29] B. Korte, J. Vygen. Kombinatorische Optimierung. *Springer-Verlag Berlin Heidelberg*, 2. Auflage, 2012.
- [30] L.T. Kou, L.J. Stockmeyer, C.K. Wong. Covering edges by cliques with regard to keyword conflicts and intersection graphs. *Communications of the ACM*, 21(2), 135–139, 1978.
- [31] Y.L. Lai, K. Williams. A survey of solved problems and applications on bandwidth, edgsum, and profile of graphs. *Journal of graph theory*, 31(2), 75–94, 1999.
- [32] J. van Leeuwen. Course: Algorithmic Modelling and Complexity (2003) Lecture Notes 12: <http://www.cs.uu.nl/docs/vakken/amc/lecture03-12.pdf> (28.08.2013)
- [33] J.C. Letelier, P.P. Weber. Spike sorting based on discrete wavelet transform coefficients. *Journal of Neuroscience Methods*, 101:93–106, 2000.
- [34] M.S. Lewicki. A review of methods for spike sorting: the detection and classification of neural action potentials. *Network: Computation in Neural Systems*, 9(4):R53–R78, 1998.
- [35] A.M. Mamlouk, H. Sharp, K.M.L. Menne, U.G. Hofmann, T. Martinetz. Unsupervised spike sorting with ICA and its evaluation using GENESIS simulations. *Neurocomputing*, 65 – 66(0):275 – 282, 2005.
- [36] O. Marre, D. Amodei, N. Deshmukh, K. Sadeghi, F. Soo, T.E. Holy, M.J. Berry II. Mapping a complete neural population in the retina. *The Journal of Neuroscience*, 32(43):14859–14873, 2012.
- [37] C.H. Papadimitriou. The NP-Completeness of the bandwidth minimization problem. *Computing*, 16(3), 263–270, 1976.
- [38] C. Pedreira, J. Martinez, M.J. Ison, R.Q. Quiroga. How many neurons can we see with current spike sorting algorithms? *Journal of Neuroscience Methods*, 211:58–65, 2012.
- [39] F. Pellegrini. Bounds for the bandwidth of the d -ary deBruijn graph. *Parallel Process. Lett.*, 3, 431–443, 1993.

- [40] J.W. Pillow, J. Shlens, E.J. Chichilnisky, E.P. Simoncelli. A Model-Based Spike Sorting Algorithm for Removing Correlation Artifacts in Multi-Neuron Recordings. *PLoS ONE*, 8(5):e62123, 2013.
- [41] S. Pissanetzky. Sparse Matrix Technology. Academic Press, London, 1984.
- [42] J.S. Prentice, J. Homann, K.D. Simmons, G. Tkačik, V. Balasubramanian, P.C. Nelson. Fast, scalable, Bayesian spike identification for multi-electrode arrays. *PLoS ONE*, 6(7):e19884, 2011.
- [43] M.C. Quirk, M.A. Wilson. Interaction between spike waveform classification and temporal sequence detection. *Journal of Neuroscience Methods*, 94(1):41 – 52, 1999.
- [44] R.Q. Quiroga, Z. Nadasdy, Y. Ben-Shaul. Unsupervised spike detection and sorting with wavelets and superparamagnetic clustering. *Neural Computation*, 16:1661–1687, 2004.
- [45] T. Reimer, W. Baumann, P.J. Koester, J. Gimsa. Gap Junction-vermittelte Signaltransmission in kortikalen neuronalen Netzwerken kultiviert auf Neurochips. *Biomedical Engineering/Biomedizinische Technik*, 55(s1), Proceedings BMT 2010, 2010.
- [46] R. Segev, J. Goodhouse, J. Puchalla, M.J. Berry II. Recording spikes from a large fraction of the ganglion cells in a retinal patch. *Nature Neuroscience*, 7(10):1155–1162, 2004.
- [47] S. Takahashi, Y. Anzai, Y. Sakurai. Automatic sorting for multi-neuronal activity recorded with tetrodes in the presence of overlapping spikes. *Journal of Neurophysiology*, 89(4):2245–2258, 2003.
- [48] V. Turau. Algorithmische Graphentheorie. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 3. Auflage, 2009.

Anhang A

Anhang

A.1 Ergebnisse der Nachbarschaftsschätzung bei realen Daten

Vorbetrachtungen

Wir betrachten die aufgezeichneten Daten von realen Netzwerken, die von einem Plexon-Programm in plx-Dateien gespeichert sind. Dabei sind verschiedene aufgezeichnete Datentypen zu unterscheiden. Relevant sind vor allem die folgenden:

1. kontinuierliche Aufzeichnungsdaten der gemessenen elektrischen Potentiale (in mV)
2. Zeitpunkte (in s) der erkannten Spikes
3. Wellenformen zu den aufgezeichneten Spikes

Diese wollen wir nun etwas genauer erläutern.

Kontinuierliche Aufzeichnungsdaten

Die kontinuierlichen Daten sind für jede Elektrode e_j eine Folge von Paaren (Aufzeichnungszeitpunkt (in s), gemessenes Potential (in mV)), deren Anzahl durch die *Aufzeichnungsdauer* T und die *Aufzeichnungsfrequenz* f_r festgelegt ist. Im betrachteten Fall ist $f_r = 40$ kHz und die Abstände der Aufzeichnungszeitpunkte $\frac{1}{f_r}$ sind somit 0.000025 s. Dieses Zeitintervall zwischen zwei Aufzeichnungszeitpunkten wollen wir als *Zeiteinheit* bezeichnen. Damit können wir die kontinuierlichen Aufzeichnungsdaten als Vektor von Potentialen $\mathbf{r}^{(j)}$ ansehen. Die i -te Komponente dieses Vektors ist dann der gemessene Potentialwert zur i -ten Zeiteinheit.

Zeitpunkte der erkannten Spikes

Für jede Elektrode gibt es einen Vektor von Spikezeitpunkten $\mathbf{u}^{(j)}$, die durch eine interne Methode zur Spikeerkennung bestimmt wurden. Dabei wird ein Spike erkannt, wenn der Potentialwert einen gewissen vorgegebenen Schwellwert (Threshold) unterschreitet. Der Zeitpunkt des Unterschreitens wird dann aufgezeichnet.

Wellenformen

Zu jedem aufgezeichneten Spikezeitpunkt wird zusätzlich eine sogenannte Wellenform aufgezeichnet. Dabei handelt es sich um einen Vektor, der die Potentialwerte von 56 Zeiteinheiten in der zeitlichen Umgebung des Spikezeitpunktes beinhaltet und damit den charakteristischen Potentialverlauf eines Spikes für weitere Analysen abbildet.

Filterung (Glättung) der kontinuierlichen Aufzeichnungsdaten

Da die Daten verrauscht sind, sei es durch zufällige Störungen oder durch weiter entfernte Zellen, deren Signale nur sehr schwach sind, wird versucht, durch Filterung der Daten das Rauschen zu unterdrücken und die wesentlichen Merkmale (die Spikes) stärker hervorzuheben. Dazu gibt es verschiedene Typen von Filtern. Relativ einfache Filter sind Rechteckfilter und Binomialfilter, aber es gibt auch andere, welche beispielsweise auf der Minimierung der Totalen Variation (TV) beruhen. Das bewirkt, dass das Signal nicht mehr so stark „hin und her zappelt“, da die Summe der Abstände der aufeinanderfolgenden Signalwerte minimiert wird. Im Detail passiert Folgendes: Sei \mathbf{r} der Vektor mit T Komponenten, der die kontinuierlichen Potentialwerte enthält. Dann suchen wir eine Lösung $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^T$ des folgenden Optimierungsproblems:

$$f_1(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^T (r_k - x_k)^2 + \lambda \sum_{k=1}^{T-1} |x_{k+1} - x_k| \rightarrow \min \quad (\text{A.1})$$

für einen geeignet zu wählenden Parameter $\lambda \geq 0$. Statt der Absolutbeträge der Differenzen $x_{k+1} - x_k$ kann auch das Quadrat dieser genommen werden, was das Problem vereinfacht:

$$f_2(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^T (r_k - x_k)^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{k=1}^{T-1} (x_{k+1} - x_k)^2 \rightarrow \min. \quad (\text{A.2})$$

Dann handelt es sich um ein quadratisches Optimierungsproblem mit konvexer Zielfunktion, das ein eindeutiges Minimum besitzt und dessen Lösung über das Nullset-

zen des Gradienten berechenbar ist.

$$\frac{\partial f_2}{\partial x_k} = \begin{cases} (\lambda + 1) \cdot x_k - \lambda \cdot x_{k+1} - r_k, & k = 1, \\ (2\lambda + 1) \cdot x_k - \lambda \cdot (x_{k+1} + x_{k-1}) - r_k, & k = 2, \dots, T-1, \\ (\lambda + 1) \cdot x_k - \lambda \cdot x_{k-1} - r_k, & k = T. \end{cases}$$

Das führt auf folgendes tridiagonale diagonaldominante Gleichungssystem, dessen eindeutige Lösung dann auch das Optimierungsproblem löst.

$$A\mathbf{x} = \mathbf{r}$$

mit $A = \begin{pmatrix} \lambda + 1 & -\lambda & & & \\ -\lambda & 2\lambda + 1 & -\lambda & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\lambda & 2\lambda + 1 & -\lambda \\ & & & -\lambda & \lambda + 1 \end{pmatrix}$

Das Problem (A.1) ist etwas schwieriger zu lösen. Einen Algorithmus, der das dazu duale Problem löst, findet sich in [9].

Kurzworstellung von Spikeerkennungsalgorithmen

Als erstes einfaches Verfahren gibt es die Spikeerkennung über einen Potentialschwollenwert η_p , der auch vom Plexon-Programm angewendet wird. Dabei werden solche Zeiteinheiten t als Spikezeitpunkte definiert, für die

$$r_{t-1}^{(j)} \geq \eta_p \quad \wedge \quad r_t^{(j)} < \eta_p$$

gilt. Eine weitere Methode ist das Suchen von hinreichend lokalen Minima mittels zweier Schwellenwerte für die Steilheit des Abstiegs η_- und des darauffolgenden Anstiegs η_+ der Potentialwerte, die in Abschnitt 2.2.2 beschrieben wurde. Eine dritte Methode ist die Nutzung eines *Nichtlinearen Energie-Operators (NEO)*, um Spikes zu erkennen. Der NEO Ψ für Folgen von diskreten Zeitpunkten ist wie folgt definiert:

$$\Psi(t) := r_t^2 - r_{t-1} \cdot r_{t+1}.$$

Auch hier gibt es wieder einen Schwellenwert η_n , womit dann ein Spike zum Zeitpunkt t erkannt wird, falls

$$\Psi(t-1) \leq \eta_n \quad \wedge \quad \Psi(t) > \eta_n$$

gilt. Der Schwellenwert wird hierbei üblicherweise auf den Wert $\eta_n = 4\sigma$ gesetzt, wobei σ die geschätzte Standardabweichung des Rauschens auf der Elektrode ist.

Um die Standardabweichung des Rauschens zu schätzen, wird ein signalfreier Ausschnitt aus den Aufzeichnungsdaten der elektrischen Potentiale genommen. Mit dem zugehörigen Potentialvektor $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^T$ und $\bar{r} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T r_t$ ergibt sich

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{T-1} \sum_{t=1}^T (r_t - \bar{r})^2}.$$

Vergleichende Analyse von Netzwerken mittels Anwendung der Nachbarschaftsbestimmung

In diesem Abschnitt wollen wir verschiedene reale Netzwerke vergleichen. Vergleichskriterium ist dabei die Anzahl der gefundenen Nachbarschaften bei unterschiedlichen Wertekombinationen der Parameter ν und δ . Wir erinnern daran, dass wir ν als eine untere Schranke für die Anzahl der Spikes je Neuron und δ als eine obere Schranke für die Absolutbeträge der relativen Verzögerungen betrachten, siehe auch die Bedingungen 2.3.1 und 2.3.2. Algorithmisch ist δ proportional zur Größe des Suchbereichs für die relativen Verzögerungen und ν dient als Threshold für die Anzahl an, im Rahmen der Fehlertoleranz, gleichen relativen Verzögerungen. Wir verwenden hier die durch Potential-Thresholding erkannten Spikes, die in der jeweiligen Datei bereits gespeichert sind. Kanäle mit mehr als 30 erkannten Spikes pro Sekunde wurden entfernt, da sie vermutlich zu einem großen Teil aus Rauschen bestehen und somit das Ergebnis eher verfälschen, als dass sie brauchbare Informationen liefern. Die Dateien mit den Aufzeichnungsdaten stammen von Matthias Nissen. Wir nutzen nur einen gewissen zeitlichen Ausschnitt, in diesem Fall $T = 300$ Sekunden, für die Nachbarschaftsanalyse, da es sonst Speicherprobleme gibt. Wir verwenden hier in der Auswertung zur besseren Vergleichbarkeit ein relatives ν , dass wir mit ν_{rel} bezeichnen wollen und das die Anzahl der Übereinstimmungen pro Sekunde angibt. Das absolute ν ist dann gleich $\nu_{rel} \cdot T$. Das δ geben wir in Zeiteinheiten $\frac{1}{f_r}$ an, bei einer Aufzeichnungsfrequenz von $f_r = 40$ kHz ist dann eine Zeiteinheit also $\frac{1}{40}$ ms. Sei \mathcal{N} die Menge der vom Programm geschätzten Nachbarschaften, siehe Abschnitt 2.2. Wir erinnern nochmal an die Elektrodenmenge $\mathcal{E} = \{e_1, \dots, e_n\}$ aus Abschnitt 2.1. Dann sei $\mathcal{N}_p = \{\{e_i, e_j\} \in \mathcal{E}^2 : \exists N \in \mathcal{N} \text{ mit } \{i, j\} \subset N\}$ die Menge aller ungeordneten Elektrodenpaare, die in mindestens einer der geschätzten Nachbarschaften als Teilmenge enthalten sind. In der jeweiligen Tabelle sind für jedes Netzwerk zu jeder betrachteten Kombination aus δ und ν_{rel} die folgenden Daten angegeben: $|\mathcal{N}|/|\mathcal{N}_p|$.

Beim ersten hier betrachteten Netzwerk, dessen Ergebnisse in den Tabellen A.1.1 und A.1.2 zu finden sind, ist manches so, wie man es erwarten würde.

- In beiden Aufzeichnungsintervallen gibt es eine ähnliche Anzahl von Spikes (12379 zu 13126).

$\delta \backslash \nu_{rel}$	0.01	0.02	0.05	0.1	0.2	0.5	1	2	5
1	38/38	3/3	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
2	47/47	4/4	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
5	70/70	5/5	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
10	89/86	6/6	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
20	118/102	8/8	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
50	152/115	12/12	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
100	160/113	21/19	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
200	137/99	29/23	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
500	83/71	45/32	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
1000	55/53	52/36	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0

Tab. A.1.1: Chip 1 07.08.2014 im Zeitintervall $[100s, 400s]$ mit 49 aktiven Elektroden und 12379 Spikes.

$\delta \backslash \nu_{rel}$	0.01	0.02	0.05	0.1	0.2	0.5	1	2	5
1	42/42	5/5	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
2	58/58	8/8	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
5	74/74	7/7	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
10	94/89	10/10	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
20	122/103	11/11	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
50	156/110	16/14	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
100	173/117	28/22	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
200	146/105	36/27	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
500	93/82	50/36	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0
1000	69/63	51/38	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0	0/0

Tab. A.1.2: Chip 1 07.08.2014 im Zeitintervall $[800s, 1100s]$ mit 49 aktiven Elektroden und 13126 Spikes.

- Mit zunehmenden ν_{rel} nimmt sowohl $|\mathcal{N}|$ als auch $|\mathcal{N}_p|$ ab.

Es gibt allerdings auch schon einige Phänomene zu beobachten, die an der Aussagekraft der Daten Zweifel aufkommen lassen. Diese wollen wir nun beschreiben und auch ein paar mögliche Erklärungen dafür liefern.

- Nur bei kleinen Werten von ν_{rel} werden Nachbarschaften gefunden. Da jedoch $\nu_{rel} = 0.01$ einem $\nu = 3$ entspricht, können in diesem Fall die gefundenen Übereinstimmungen bei den relativen Verzögerungen auch reiner Zufall sein, was sie vermutlich auch sind. Für $\nu_{rel} = 0.02$ gilt Ähnliches.
- In vielen Fällen gilt $|\mathcal{N}| > |\mathcal{N}_p|$. Dies lässt sich dadurch erklären, dass zu vielen Nachbarschaften N mit $|N| \geq 3$ auch viele oder sogar alle Teilnachbarschaften als eigenständige Nachbarschaften gefunden werden, die zwar in \mathcal{N} alle aufgenommen werden, aber keinen zusätzlichen Beitrag zu \mathcal{N}_p leisten.
- Eigentlich wäre es einleuchtend, wenn mit zunehmenden δ die Anzahl der gefundenen Nachbarschaften wachsen würde, da die Suchbereiche für relative Verzögerungen eine aufsteigende Kette für zunehmende δ bilden, also alle häufig vorkommenden relativen Verzögerungen bei kleinerem δ auch gefunden werden, wenn das δ größer wird. Eine Erklärung für die beobachtete Anomalie ist, dass bei kleinem ν_{rel} und großem δ viele (auch zufällig entstandene) relative Verzögerungen gefunden werden und so der geschätzte Verzögerungsgraph viele Kanten enthält. Da die Nachbarschaftssuche Greedy-basiert ist, werden nicht alle möglichen Nachbarschaften gefunden, die von einem Knoten ausgehen und nur je einen Knoten einer Schicht beinhalten. Das heißt, bei hoher Kantenanzahl ist die Wahrscheinlichkeit geringer, dass eine bestimmte Nachbarschaft gefunden wird. Da für die Anzahl der Nachbarschaften das ν_{rel} auch als Threshold fungiert, können so einige Nachbarschaften aus der Betrachtung wieder herausfallen.

Als Fazit können wir festhalten: Kleine ν_{rel} liefern sehr wahrscheinlich keine zuverlässigen Ergebnisse und das Nichtvorhandensein der Monotonie bei $|\mathcal{N}|$ und $|\mathcal{N}_p|$ in Abhängigkeit von δ stützt diese These.

Insgesamt kann man für dieses Netzwerk sagen, dass wahrscheinlich keine brauchbaren Nachbarschaften gefunden wurden.

Beim zweiten Netzwerk, dessen Ergebnisse in den Tabellen A.1.3 und A.1.4 zu finden sind, geht die Feuerrate im Laufe der Zeit interessanterweise stark zurück (46415 zu 24446 Spikes). Vermutlich sind die betrachteten Zeiträume zufällig so gewählt, dass einmal ein Zeitraum hoher Aktivität und einmal einer mit niedriger Aktivität betrachtet wurde. Dementsprechend ist auch die Anzahl der gefundenen Nachbarschaften im ersten Zeitraum bei gleichen Parameterkombinationen höher

$\delta \backslash \nu_{rel}$	0.01	0.02	0.05	0.1	0.2	0.5	1	2	5
1	102/95	41/40	11/11	2/2	2/2	1/1	1/1	1/1	0/0
2	116/101	50/46	12/11	2/2	2/2	2/2	2/2	2/2	0/0
5	154/117	75/67	16/13	4/4	3/3	2/2	2/2	2/2	0/0
10	245/126	107/77	23/20	11/11	9/9	8/8	5/5	2/2	0/0
20	313/130	148/94	34/25	16/17	12/12	8/8	4/6	4/4	0/0
50	406/140	207/101	40/29	20/20	11/12	9/9	5/7	5/5	0/0
100	447/136	232/99	45/34	20/20	11/12	9/9	5/7	5/5	0/0
200	406/138	257/97	52/39	20/20	11/12	9/9	5/7	5/5	0/0
500	277/160	194/99	52/39	20/20	11/12	9/9	5/7	5/5	0/0
1000	218/168	164/108	52/39	20/20	11/12	9/9	5/7	5/5	0/0

Tab. A.1.3: Chip 1 19.09.2013 im Zeitintervall $[100s, 400s]$ mit 21 aktiven Elektroden und 46415 Spikes.

$\delta \backslash \nu_{rel}$	0.01	0.02	0.05	0.1	0.2	0.5	1	2	5
1	54/53	18/17	6/6	2/2	2/2	2/2	1/1	0/0	0/0
2	69/64	24/23	6/6	2/2	2/2	2/2	2/2	1/1	0/0
5	93/80	34/30	8/8	4/5	2/2	2/2	2/2	1/1	0/0
10	141/90	49/39	17/17	12/12	9/9	5/6	3/4	1/1	0/0
20	180/101	63/47	22/20	12/12	10/10	4/7	3/5	1/1	0/0
50	228/111	97/65	22/20	11/12	9/10	4/7	3/5	1/1	0/0
100	268/116	131/73	22/20	11/12	9/10	4/7	3/5	1/1	0/0
200	259/116	148/75	22/20	11/12	9/10	4/7	3/5	1/1	0/0
500	185/125	168/77	22/20	11/12	9/10	4/7	3/5	1/1	0/0
1000	154/143	178/76	22/20	11/12	9/10	4/7	3/5	1/1	0/0

Tab. A.1.4: Chip 1 19.09.2013 im Zeitintervall $[800s, 1100s]$ mit 21 aktiven Elektroden und 24446 Spikes.

als im zweiten Zeitraum. Auffällig bei diesem Netzwerk ist ein deutlicher Anstieg der gefundenen Nachbarschaften von $\delta = 5$ zu $\delta = 10$ bei beliebigem ν_{rel} und vor allem bei den aussagekräftigeren Werten ab $\nu_{rel} = 0.1$. Ab $\delta = 50$ gibt es dort keine Veränderungen mehr.

$\delta \backslash \nu_{rel}$	0.01	0.02	0.05	0.1	0.2	0.5	1	2	5
1	154/130	78/69	19/18	12/12	6/6	4/4	2/2	0/0	0/0
2	188/139	100/82	26/23	12/12	6/6	4/4	2/2	0/0	0/0
5	270/152	149/96	37/27	17/15	9/9	5/5	2/2	0/0	0/0
10	401/156	214/107	68/39	32/23	21/18	13/11	4/5	1/1	0/0
20	496/166	280/110	109/40	51/31	30/25	19/16	5/6	1/1	0/0
50	528/164	295/111	134/46	59/31	34/27	22/17	5/6	1/1	0/0
100	413/165	261/117	139/50	59/31	34/27	22/17	5/6	1/1	0/0
200	247/156	202/114	146/58	59/31	34/27	22/17	5/6	1/1	0/0
500	255/185	169/145	156/62	59/31	34/27	22/17	5/6	1/1	0/0
1000	232/211	151/160	137/67	59/31	34/27	22/17	5/6	1/1	0/0

Tab. A.1.5: Chip 1 24.09.2013 im Zeitintervall $[100s, 400s]$ mit 24 aktiven Elektroden und 56304 Spikes.

Die Ergebnisse des dritten Netzwerkes sind in den Tabellen A.1.5 und A.1.6 zusammengefasst. Dieses Netzwerk ist dem vorangegangenen sehr ähnlich, hier sind die Spikeanzahlen allerdings etwas stabiler. Auch hier sind für ein festes $\nu_{rel} \geq 0.1$ die Nachbarschaften ab $\delta = 50$ stabil. Diese Stabilität kann man als ein Gütekriterium ansehen, da zufällige Einflüsse bei diesen Parameterkombinationen wohl nur noch eine geringere Rolle spielen.

Zusammenfassend kann man folgende Schlüsse ziehen:

- Ergebnisse für Parameterkombinationen mit $\nu_{rel} < 0.1$ sind starken zufälligen Einflüssen unterworfen und daher wenig aussagekräftig.
- Für $\nu_{rel} \geq 0.1$ gibt es bei $|\mathcal{N}|$ und $|\mathcal{N}_p|$ ab $\delta = 50$ keine Veränderungen mehr, die Ergebnisse bleiben stabil, was für die Aussagekraft der Ergebnisse spricht. Also können wir $\delta = 50$ als empirisch idealen Parameter ansehen, da größere δ nur zusätzlichen Rechenaufwand bringen.
- Für ν_{rel} eine gute Wahl zu treffen ist schwieriger. Je größer es gewählt wird, desto zuverlässiger sind die gefundenen Nachbarschaften. Allerdings kann es

$\delta \backslash \nu_{rel}$	0.01	0.02	0.05	0.1	0.2	0.5	1	2	5
1	142/120	63/57	14/13	9/9	5/5	4/4	2/2	0/0	0/0
2	175/139	81/66	20/18	11/10	6/6	4/4	2/2	0/0	0/0
5	244/147	117/81	32/24	13/12	8/8	4/4	2/2	0/0	0/0
10	353/149	185/92	53/31	26/20	19/16	12/11	3/3	0/0	0/0
20	448/158	244/100	80/36	44/27	26/22	14/13	3/3	0/0	0/0
50	469/158	269/104	93/38	49/27	31/24	15/15	3/3	0/0	0/0
100	378/164	259/114	97/40	49/27	31/24	15/15	3/3	0/0	0/0
200	228/157	199/121	99/43	49/27	31/24	15/15	3/3	0/0	0/0
500	208/178	158/137	112/51	49/27	31/24	15/15	3/3	0/0	0/0
1000	224/209	143/154	115/58	49/27	31/24	15/15	3/3	0/0	0/0

Tab. A.1.6: Chip 1 24.09.2013 im Zeitintervall [800s, 1100s] mit 24 aktiven Elektroden und 48611 Spikes.

passieren, dass Neuronen mit geringer Feuerrate nicht mehr erkannt werden. Man muss also einen Kompromiss eingehen oder einfach den Algorithmus mit mehreren Werten für ν_{rel} durchlaufen lassen und die Ergebnisse dann interpretieren.

- Bei Netzwerken mit wenigen Spikes sollte man den betrachteten Zeitraum verlängern, damit die zufälligen Faktoren an Einfluss verlieren und man vielleicht auch mit niedrigeren ν_{rel} brauchbare Ergebnisse erzielt. Allerdings geht damit auch etwas an Vergleichbarkeit verloren, da sich die verwendeten absoluten ν -Werte unterscheiden.

Ein Problem ergibt sich daraus, dass die Netzwerke unterschiedliche Aktivitätsintensitäten aufweisen. So reichen die Spikeanzahlen von etwas über 10000 beim ersten Netzwerk bis zu über 50000 beim dritten Netzwerk. Auch die Anzahl der aktiven Elektroden, also Elektroden, an denen in dem betrachteten Zeitraum Signale aufgezeichnet wurden, reicht von 21 beim zweiten Netzwerk bis zu 49 beim ersten Netzwerk. Man könnte die durchschnittliche Spikerate pro Elektrode als Vergleichskriterium heranziehen, dabei wird allerdings die Varianz nicht berücksichtigt, das heißt es können auch wenige Elektroden mit sehr vielen Spikes und viele mit eher wenigen Spikes darunter seien. Bei größerem ν_{rel} kann es dann passieren, dass trotz der hohen durchschnittlichen Spikerate nur wenige Nachbarschaften gefunden

werden. Eine Möglichkeit wäre für jedes Netzwerk einen heuristischen Score-Wert einzuführen, der auf den Nachbarschaften basiert. Wir setzen $\delta = 50$ und machen mehrere Durchläufe mit unterschiedlichen ν , sodass wir auch Zellen beziehungsweise ähnliche Feuermuster von verschiedenen Zellen erfassen, die eine niedrigere Spikerate haben. Zunächst ist es aber im Sinne der Vergleichbarkeit sinnvoll die folgenden Punkte zu berücksichtigen:

- Ausschließen von irrelevanten Elektroden: dazu zählen solche mit abnorm hoher Spikerate (>30 Hz), da das hauptsächlich Rauschen sein wird und solche mit sehr niedriger Spikerate (<0.1 Hz), die aufgrund der unzureichenden Datenbasis für die Nachbarschaftsbestimmung ungeeignet erscheinen.
- Angleichen der durchschnittlichen Spikeanzahl pro Elektrode: Wähle den betrachteten Zeitraum für jedes Netzwerk individuell so, dass die durchschnittliche Spikerate pro Elektrode für jedes Netzwerk identisch ist (1000 Spikes pro Elektrode) und benutze mehrere feste ν (100, 200, 500, 1000), die nicht von der Länge des Zeitraums abhängen, um Netzwerke unterschiedlicher Aktivität besser vergleichbar zu machen.

Damit ist erstmal eine gewisse Vergleichbarkeit bezüglich der Eingabedaten gewährleistet. In Netzwerken mit mehr relevanten aktiven Elektroden können natürlich auch mehr Nachbarschaften gefunden werden, aber das ist gewollt. Man kann dies auch noch in Bezug zur Aktivität des Netzwerkes betrachten, die bei dieser Betrachtungsweise in der Länge des betrachteten Zeitraums für jedes Netzwerk enthalten ist. Ein paar Ergebnisse zu diesen Betrachtungen finden sich in den Tabellen A.1.7, A.1.8 und A.1.9.

ν	$ \mathcal{N} / \mathcal{N}_p $
100	0/0
200	0/0
500	0/0
1000	0/0

Tab. A.1.7: Chip 1 07.08.2014: 1000 durchschnittliche Spikes an 60 aktiven Elektroden in 492s ab Startzeit 10 s.

ν	$ \mathcal{N} / \mathcal{N}_p $
100	6/7
200	4/5
500	1/1
1000	0/0

Tab. A.1.8: Chip 1 19.09.2013: 1000 durchschnittliche Spikes an 21 aktiven Elektroden in 127s ab Startzeit 10 s.

ν	$ \mathcal{N} / \mathcal{N}_p $
100	6/7
200	2/2
500	0/0
1000	0/0

Tab. A.1.9: Chip 1 24.09.2013: 1000 durchschnittliche Spikes an 24 aktiven Elektroden in 92s ab Startzeit 10 s.

Selbstständigkeitserklärung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt und ohne fremde Hilfe verfasst habe, keine außer den von mir angegebenen Hilfsmitteln und Quellen dazu verwendet habe und die den benutzten Werken inhaltlich und wörtlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Rostock, 26. August 2016

Thesen

1. Nervenzellkulturen werden auf Chips mit Multielektrodenarrays angesiedelt, um Signale von einzelnen Neuronen zu erhalten und beispielsweise zu analysieren, wie sie auf externe Stimulation reagieren.
2. Die Signale unterschiedlicher Neuronen überlagern sich dabei an den Elektroden und müssen zunächst entkoppelt werden, um Rückschlüsse auf einzelne Neuronen zu ermöglichen.
3. Es muss bei Multielektrodenarrays entschieden werden, ob die Aufzeichnungen an verschiedenen Elektroden durch eine oder durch mehrere Zellen verursacht werden.
4. Hilfreich dafür ist die in der Arbeit entwickelte algorithmische Schätzung der Menge der Elektroden, von denen die Signale eines Neurons aufgezeichnet werden. Diese nennen wir die Nachbarschaft des Neurons.
5. Diese Schätzung kann auf Grund von konstanten zeitlichen Verzögerungen der Aufzeichnungen eines Signals an unterschiedlichen Elektroden vorgenommen werden.
6. Mittels Vergleiches der Aufzeichnungszeitpunkte an Paaren von Elektroden können häufig vorkommende zeitliche Verzögerungen erkannt werden.
7. Aus der Struktur des damit erzeugten Verzögerungsgraphen werden dann die Nachbarschaften bestimmt.
8. Diese Vorgehensweise kann auch zu einem Spike-Sorting-Ansatz weiterentwickelt werden, für den in einer messfehlerfreien Umgebung Bedingungen für die eindeutige Rekonstruktion entwickelt werden.
9. Tests mit der Realität nachempfundenen simulierten Daten liefern vielversprechende Ergebnisse.
10. Vorliegende reale Daten erfüllen allerdings die benötigten Voraussetzungen des Algorithmus kaum, insbesondere enthalten die Nachbarschaften der Neuronen oft nur eine Elektrode. Damit sind die Ergebnisse bei den realen Daten nicht sehr aussagekräftig.
11. Effizienzbetrachtungen zu einem Ansatz, mit fehlenden Aufzeichnungsdaten umzugehen, motivieren die Bestimmung der Bandbreite des speziellen Graphen $G_{n,k,b}$.

12. Für einen einfachen Graphen $G = (V, E)$ mit $|V| = n$ wird eine Bijektion $f : V \rightarrow [n]$ eine *Nummerierung* von G genannt. Die *Bandbreite* von G ist definiert als

$$B(G) := \min\{B_f(G) : f \text{ ist eine Nummerierung von } G\}.$$

13. Die Bandbreite des Graphen $G_{n,k,b} = (V_{n,k,b}, E_{n,k,b})$ kann für verschiedene Parameterkonstellationen $n, k, b \in \mathbb{N}$ in einigen Fällen exakt, in anderen Fällen zumindest asymptotisch bestimmt werden. Dabei ist

$$V_{n,k,b} = \left\{ X \in \binom{[0, n]}{k} : \overline{X} - \underline{X} \leq b \right\}$$

mit $\binom{[0, n]}{k} = \{X \subseteq [0, n] : |X| = k\}$, $\underline{X} := \min(X)$ und $\overline{X} := \max(X)$ sowie

$$E_{n,k,b} = \left\{ \{X, Y\} \subseteq V_{n,k,b} : \overline{X \cup Y} - \underline{X \cup Y} \leq b \right\}.$$

14. Die lexikographische Ordnung der Knoten ergibt für $k \geq 2$:
 Wenn $b = o(n^{\frac{1}{k+1}})$ ist, dann gilt für hinreichend großes n : $B(G_{n,k,b}) = k \binom{b}{k}$.
 Falls $b = o(n)$ ist, dann gilt $B(G_{n,k,b}) \sim k \binom{b}{k}$ für $n \rightarrow \infty$.
15. Mit einer Spiegelungsidee kann die lexikographische Anordnung zur Palindrom-Ordnung verbessert werden, die für $k \geq 2$ das folgende Resultat liefert:
 Falls $b \geq \frac{n+k-1}{2}$ gilt, dann ist

$$B(G_{n,k,b}) = \left\lceil \frac{(n+1) \binom{b}{k-1} - (k-1) \binom{b+1}{k} + \binom{2b-n+1}{k} - 2}{2} \right\rceil.$$

16. Eine Einbettung des Graphen in das Einheitsquadrat liefert mit komplizierteren Anordnungen und analytischen Methoden asymptotische Resultate für $b \sim \beta n$ für $n \rightarrow \infty$ mit $\beta \in (0, 0.5]$:
 Mit $k \geq 2$ sowie $1 = q\beta + r$ mit $q \geq 2$ ganz und $0 \leq r < \beta$ gilt:

- (a) Wenn $r \leq \frac{q-1}{q^2+q-1}$ ist, dann gilt $B(G_{n,k,b}) \sim c_1(\beta, k) n^k$.
 (b) Wenn $r > \frac{q-1}{q^2+q-1}$ ist, dann gilt $\max\{c_1(\beta, k), c_2(\beta, k) + \frac{1}{q^{k-1}} c_3(\beta, k)\} n^k \lesssim B(G_{n,k,b}) \lesssim (c_2(\beta, k) + c_3(\beta, k)) n^k$.

17. Verallgemeinerungen der Resultate von $k \in \mathbb{N}$ auf Mengen $K \subset \mathbb{N}$ sind möglich.